



UNITÉ DE RECHERCHE  
IRIA-SOPHIA ANTIPOLIS

Institut National  
de Recherche  
en Informatique  
et en Automatique

Domaine de Voluceau  
Rocquencourt  
B.P.105  
78153 Le Chesnay Cedex  
France  
Tél.: (1) 39 63 55 11

# Rapports de Recherche

N° 1476

*Programme 6*  
*Calcul Scientifique, Modélisation et*  
*Logiciels numériques*

## UN MODELE NUMERIQUE DE TYPE BLOTTNER POUR LES ECOULEMENTS HYPERSONIQUES VISQUEUX HORS-EQUILIBRE EN ELEMENTS FINIS DECENTRES

Nathalie GLINSKY

Juillet 1991



**UN MODELE NUMERIQUE  
DE TYPE BLOTTNER  
POUR LES ECOULEMENTS  
HYPERSONIQUES  
VISQUEUX  
HORS-EQUILIBRE  
EN ELEMENTS FINIS  
DECENTRES**

**Nathalie GLINSKY**

**INRIA Sophia-Antipolis  
06560 Valbonne  
France**

# **UN MODELE NUMERIQUE DE TYPE BLOTTNER POUR LES ECOULEMENTS HYPERSONIQUES VISQUEUX HORS-EQUILIBRE EN ELEMENTS FINIS DECENTRES**

Nathalie GLINSKY

INRIA, Sophia-Antipolis, 06560 VALBONNE, FRANCE

Résumé: On présente une méthode de résolution des équations de Navier-Stokes auxquelles on ajoute un modèle de dissociation chimique hors-équilibre pour la simulation numérique des écoulements hypersoniques de corps arrondis tels qu'ils apparaissent à l'avant d'engins spatiaux lors de la rentrée atmosphérique. Dans une approche pseudo-stationnaire, on utilise une discrétisation spatiale de type mixte: Volumes Finis décentrés pour les termes convectifs et Eléments Finis P1 centrés pour les termes diffusifs, applicable à des maillages triangulaires non structurés. Les termes de viscosité, de conductivité thermique et de diffusion sont calculés par application du modèle de Blottner. L'extension à l'ordre 2 est faite par la méthode M.U.S.C.L.. L'introduction des équations de bilan des espèces est réalisée selon l'approche découplée et l'utilisation d'un  $\gamma$ -équivalent. Le terme de production des espèces est traité implicitement. Une comparaison de différentes méthodes de calculs des flux convectifs est faite. On présente des solutions numériques d'écoulements autour de corps émoussés et d'une géométrie de double-ellipse modélisant la navette européenne HERMES.

# **A BLOTTNER TYPE NUMERICAL MODEL FOR NONEQUILIBRIUM VISCOUS HYPERSONIC FLOWS IN UPWIND FINITE ELEMENTS**

Nathalie GLINSKY

INRIA, Sophia-Antipolis, 06560 VALBONNE, FRANCE

**Abstract:** We present a method for solving the Navier-Stokes equations augmented with a nonequilibrium dissociation model for the numerical simulation of the hypersonic blunt-body flow as it occurs in the nose region of a space vehicle during its atmospheric reentry. In a pseudo-unsteady approach, we use a mixed spatial discretization: upwind Finite-Volume for the convective terms and centered P1 Finite-Elements for the diffusive terms, applicable to unstructured triangular meshes. The viscosity, conductivity and diffusion terms are calculated by the Blottner model. The extension to the second order accuracy is constructed via the M.U.S.C.L. technique. The introduction of the species equations is realized in an uncoupled approach using an equivalent  $\gamma$ . The production rate terms are treated implicitly. A comparison between several methods to calculate the convective terms is done. We present numerical solutions of flows around blunt bodies and a double-ellipse modelling the European space shuttle HERMES.

# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>3</b>
<b>1 Le modèle physique</b>	<b>4</b>
1.1 Les équations de conservation scalaires . . . . .	4
1.2 La pression du mélange . . . . .	5
1.3 L'équation d'énergie . . . . .	5
<b>2 Le modèle mathématique</b>	<b>5</b>
2.1 Les équations . . . . .	5
2.2 Viscosité, conductivité thermique et coefficient de diffusion . . .	8
2.3 Les conditions au bord . . . . .	9
2.4 Les conditions initiales . . . . .	10
<b>3 L'adimensionnement des équations</b>	<b>10</b>
<b>4 L'approximation spatiale</b>	<b>12</b>
4.1 Le calcul des flux convectifs . . . . .	14
4.1.1 L'extension à l'ordre deux . . . . .	14
4.1.2 La décomposition de flux de van Leer . . . . .	16
4.1.3 Ordre deux avec recentrage à la paroi . . . . .	18
4.1.4 L'extension du flux de van Leer par Hänel . . . . .	19
4.1.5 Le schéma d'Osher . . . . .	19
4.2 Calcul des flux diffusifs . . . . .	20
4.3 Traitement des termes de bord . . . . .	21
4.3.1 La paroi $\partial\mathcal{D}_B$ . . . . .	21
4.3.2 Bords entrants et sortants $\partial\mathcal{D}_\infty$ et $\partial\mathcal{D}_S$ . . . . .	21
<b>5 Méthode semi-implicite de résolution</b>	<b>21</b>
<b>6 Résultats numériques</b>	<b>23</b>
6.1 Calculs autour d'un corps arrondi . . . . .	23
6.2 Ecoulement à $30^\circ$ d'incidence . . . . .	48
<b>7 Conclusions</b>	<b>53</b>

## TABLE DES MATIÈRES

2

<b>8</b>	<b>Annexe</b>	<b>54</b>
8.1	Les enthalpies de formation . . . . .	54
8.2	Les températures de vibration . . . . .	54
8.3	Le modèle de Park . . . . .	54
8.4	Le calcul des termes source . . . . .	56
8.5	La matrice jacobienne de $\Omega$ . . . . .	57
8.6	Le modèle de Blottner . . . . .	59
	<b>Bibliographie</b>	<b>60</b>

## Introduction

Ce travail fait suite à plusieurs articles [5], [9] présentant le développement d'une méthode numérique efficace pour la résolution d'écoulements hypersoniques non visqueux hors-équilibre chimique. La méthode explicite d'ordre un [5] est basée sur une formulation mixte Volumes Finis/ Eléments Finis applicable à des maillages non structurés. L'opérateur est découplé en une partie fluide et une partie bilan des espèces. Le terme source, terme de production des espèces, est traité implicitement. L'approximation spatiale est faite en appliquant un schéma décentré tenant compte des espèces et selon la méthode du " $\gamma$ -équivalent". La précision spatiale est étendue à l'ordre 2 [9] selon la méthode M.U.S.C.L. [24], [25].

Si l'on souhaite étudier l'écoulement dans tout le domaine, notamment près de la paroi, il convient de tenir compte des phénomènes de diffusion. Les équations de Navier-Stokes pour un gaz parfait sont souvent décrites dans la littérature; ce n'est pas le cas pour un mélange de gaz réactifs. Les phénomènes qui interviennent sont nombreux et complexes et leur modélisation est encore de nos jours un sujet de recherche.

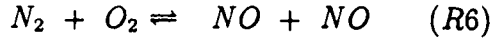
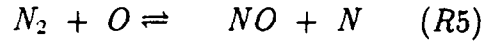
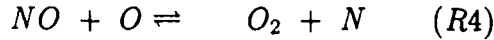
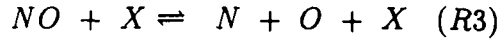
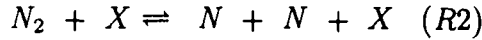
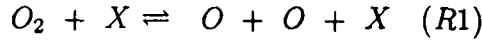
Le but de ce travail n'est pas la description théorique des processus physico-chimiques. Une étude très détaillée de la modélisation des termes de transport a été effectuée par M. Imbert [14] pour des lasers à diffusion supersonique et P. Gubernatis [12] pour des écoulements hypersoniques en tuyère. Souhaitant utiliser un modèle relativement simple à implémenter, nous avons conservé le système des cinq espèces déjà étudié dans les travaux antérieurs. Des systèmes plus complets peuvent comporter de nombreuses espèces: G. Candler [4] étudie un modèle comportant sept espèces chimiques, une température de vibration par espèce diatomique et une température de translation électronique conduisant à un système de quinze équations aux dérivées partielles. On trouvera dans [21] un ensemble assez complet de travaux sur ce sujet.

Un premier modèle très simplifié (nombre de Lewis nul) avait été présenté dans [2]. Nous étudions, dans ce rapport, un modèle d'écoulements visqueux réactifs simplifié (nombre de Lewis constant) qui va cependant nous permettre d'évaluer les difficultés numériques qu'entraîne la présence de termes diffusifs dans les équations. Nous détaillons également l'influence du traitement des flux convectifs, notamment près de la paroi.

## 1 Le modèle physique

Dans des conditions normales de température, l'air qui nous entoure est composé essentiellement de 79% d'azote et 21% d'oxygène diatomiques. Cependant, il n'est pas inerte et sa composition dépend de sa température. Dès que celle-ci s'élève ( $T \geq 2500K$ ), les espèces diatomiques présentes,  $O_2$  et  $N_2$ , réagissent. Il se produit des dissociations, des recombinaisons et de l'ionisation qui vont transformer la composition initiale en un mélange de nombreuses espèces:  $N_2$ ,  $O_2$ ,  $NO$ ,  $N$ ,  $O$ ,  $NO^+$ ,  $O^+$ ,  $N^+$ ,  $O^-$ ,  $N^-$ ,  $e^-$  ... dont la proportion est fonction de la température. Nous considérons donc dans ce travail, un mélange de cinq espèces:  $O$ ,  $N$ ,  $NO$ ,  $O_2$  et  $N_2$  indicées de 1 à 5 dans cet ordre; les phénomènes d'ionisation ne sont pas pris en compte.

Nous étudions le modèle de Y.B. Zeldovich [22] composé de 18 réactions réversibles



$X$  est un facteur de collision qui peut être n'importe laquelle des cinq espèces présentes. La production d'espèces à partir de  $O_2$  et  $N_2$  est endothermique; les réactions vont donc provoquer une baisse importante de la température par rapport au cas d'un gaz figé, c'est à dire un gaz dans lequel  $O_2$  et  $N_2$  ne réagiraient pas.

### 1.1 Les équations de conservation scalaires

La composition du mélange est définie par les valeurs des fractions massiques  $Y_s = \frac{m_s}{m}$  où  $m_s$  est la masse de l'espèce  $s$  contenue dans un volume de contrôle  $\mathcal{V}$  et  $m$  la masse du mélange pour ce même volume. Par définition des fractions massiques  $Y$ , on obtient une première équation de conservation de la masse du mélange

$$\sum_{s=1}^5 Y_s = 1$$

D'autre part, on se placera dans le cas de modèles pour lesquels la proportion d'atomes d'oxygène  $O$  et d'azote  $N$  monoatomiques est constante pour un volume de contrôle (nombre de Lewis constant); cette proportion est celle du gaz



non dissocié. On obtient ainsi une seconde équation de conservation

$$\frac{\frac{Y_{N_2}}{\overline{m}_N} + \frac{Y_N}{\overline{m}_N} + \frac{Y_{NO}}{\overline{m}_{NO}}}{\frac{Y_{O_2}}{\overline{m}_O} + \frac{Y_O}{\overline{m}_O} + \frac{Y_{NO}}{\overline{m}_{NO}}} = \frac{79}{21}$$

où  $\overline{m}_s$  est la masse molaire de l'espèce  $s$ . Ces deux équations de conservation scalaires nous permettront de n'étudier que trois équations aux dérivées partielles pour les cinq espèces, les quantités de  $O_2$  et  $N_2$  étant déduites de celles des trois autres espèces.

## 1.2 La pression du mélange

La pression d'un mélange de gaz parfaits est obtenue en appliquant la loi de Dalton aux pressions partielles

$$P = \sum_{s=1}^5 P_s = \rho R T \sum_{s=1}^5 \frac{Y_s}{\overline{m}_s}$$

où  $R_s = \frac{R}{\overline{m}_s}$  est la constante spécifique du gaz.

## 1.3 L'équation d'énergie

La température du mélange est calculée à partir de l'équation d'énergie

$$E = \frac{1}{2} \rho \| \vec{V} \|^2 + \sum_{s=1}^5 \rho_s c_{v,s} T + \sum_{s=1}^3 \rho_s h_s^0 + \sum_{s=3}^5 \frac{\rho_s R_s \Theta_{v,s}}{e^{\frac{\Theta_{v,s}}{T}} - 1}$$

Le dernier terme de l'équation représente les énergies de vibration, considérées à l'équilibre avec le reste du système puisqu'elles ne dépendent que d'une seule température, celle du mélange. Les valeurs des énergies de vibration se trouvent en annexe.

# 2 Le modèle mathématique

## 2.1 Les équations

Le modèle mathématique étudié se compose des équations de Navier-Stokes auxquelles on ajoute les équations de bilan des espèces, contenant des termes de diffusion.

On cherche la solution stationnaire du système écrit en formulation conservative et en deux dimensions d'espace

$$\begin{cases} \frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x}(W) + \frac{\partial G}{\partial y}(W) = \frac{\partial R}{\partial x}(W) + \frac{\partial S}{\partial y}(W) + \Omega(W) & \text{dans } \mathcal{D} \times ]0, T[, \\ W(x, y, 0) = W_0(x, y) & \text{dans } \mathcal{D}, \\ \text{conditions aux limites} \end{cases} \quad (1)$$

$\mathcal{D}$  est un domaine borné polygonal de  $\mathbb{R}^2$ ,  $T$  un réel strictement positif. Les variables conservatives sont

$$W = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ E \\ \rho_1 \\ \rho_2 \\ \rho_3 \end{pmatrix}$$

$\rho$  est la masse volumique du mélange, les  $\rho_s$  sont les masses volumiques partielles des espèces produites  $O$ ,  $N$  et  $NO$ ,  $u$  et  $v$  sont les composantes de la vitesse et  $E$  est l'énergie totale par unité de volume.

Les flux  $F$  et  $G$  et le terme source  $\Omega$  s'écrivent

$$F(W) = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ u(E + p) \\ \rho_1 u \\ \rho_2 u \\ \rho_3 u \end{pmatrix} \quad G(W) = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ v(E + p) \\ \rho_1 v \\ \rho_2 v \\ \rho_3 v \end{pmatrix} \quad \Omega(W) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \omega_1 \\ \omega_2 \\ \omega_3 \end{pmatrix}$$

Le calcul détaillé du terme source est donné en annexe.

Les flux diffusifs  $R$  et  $S$  ont pour expression

$$R(W) = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{xx} \\ \tau_{xy} \\ u\tau_{xx} + v\tau_{xy} - q_x + \sum_{s=1}^5 \rho_s h_s u_s \\ \rho_1 u_1 \\ \rho_2 u_2 \\ \rho_3 u_3 \end{pmatrix}$$

$$S(W) = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{yx} \\ \tau_{yy} \\ v\tau_{yy} + u\tau_{yx} - q_y + \sum_{s=1}^5 \rho_s h_s v_s \\ \rho_1 v_1 \\ \rho_2 v_2 \\ \rho_3 v_3 \end{pmatrix}$$

où  $h_s$  est l'enthalpie spécifique de l'espèce  $s$ ,  $h_s = \frac{\varepsilon_s + p_s}{\rho_s}$ .

Les tenseurs de contraintes de Cauchy sont

$$\begin{aligned} \tau_{xx} &= \frac{2}{3}\mu \left( 2\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} \right) \\ \tau_{yy} &= \frac{2}{3}\mu \left( 2\frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial u}{\partial x} \right) \\ \tau_{xy} &= \tau_{yx} = \mu \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \end{aligned}$$

Les flux de chaleur sont donnés par la loi de Fourier

$$q_x = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x} \text{ et } q_y = -\kappa \frac{\partial T}{\partial y}$$

où  $\kappa$  est le terme de conductivité thermique.

Les vitesses de diffusion des espèces de composantes  $u_s$  et  $v_s$  s'écrivent en appliquant la loi de Fick

$$\rho_s u_s = \rho D_s \frac{\partial Y_s}{\partial x} \text{ et } \rho_s v_s = \rho D_s \frac{\partial Y_s}{\partial y}$$

Les flux convectifs  $F$  et  $G$  sont homogènes de degré un et peuvent s'écrire

$$F(W) = A(W) W \text{ et } G(W) = B(W) W$$

en fonction des matrices jacobiniennes

$$A(W) = \frac{\partial F(W)}{\partial W} \text{ et } B(W) = \frac{\partial G(W)}{\partial W}$$

Posons pour simplifier

$$\vec{\mathcal{F}}(W) = (F(W); G(W))^T$$

Le système composé des flux convectifs est hyperbolique. Pour un vecteur  $\vec{n}$  quelconque de  $\mathbb{R}^2$ , la matrice

$$\mathcal{M}(W, \vec{n}) = \vec{n} \cdot \vec{\mathcal{F}}'(W)$$

est diagonalisable. Ses valeurs propres sont réelles et ont pour valeur

$$\begin{aligned}\lambda_1(W, \vec{n}) &= \vec{n} \cdot \vec{V} - c \\ \lambda_2(W, \vec{n}) &= \lambda_3(W, \vec{n}) = \vec{n} \cdot \vec{V} \\ \lambda_4(W, \vec{n}) &= \vec{n} \cdot \vec{V} + c \\ \lambda_5(W, \vec{n}) &= \lambda_6(W, \vec{n}) = \lambda_7(W, \vec{n}) = \vec{n} \cdot \vec{V}\end{aligned}$$

La matrice  $\mathcal{M}$  s'écrit

$$\mathcal{M}(W, \vec{n}) = T^{-1}(W, \vec{n}) \Lambda(W, \vec{n}) T(W, \vec{n})$$

où  $\Lambda = \text{diag}(\lambda_m)$  est la matrice des valeurs propres  $\lambda_m$  de  $\mathcal{M}$  et  $T$  la matrice de transformation inversible. On peut décomposer la matrice  $\mathcal{M}$  en fonction du signe de ses valeurs propres

$$\begin{aligned}\mathcal{M}(W, \vec{n}) &= \mathcal{M}^+(W, \vec{n}) + \mathcal{M}^-(W, \vec{n}) \\ |\mathcal{M}(W, \vec{n})| &= \mathcal{M}^+(W, \vec{n}) - \mathcal{M}^-(W, \vec{n})\end{aligned}$$

où

$$\mathcal{M}^\pm(W, \vec{n}) = T^{-1}(W, \vec{n}) \Lambda^\pm(W, \vec{n}) T(W, \vec{n})$$

## 2.2 Viscosité, conductivité thermique et coefficient de diffusion

Pour exprimer les quantités  $\mu$ ,  $\kappa$  et  $D$ , on adopte la démarche proposée par Candler [4].

On utilise un modèle de viscosité pour l'air réactif développé par Blottner [1] pour calculer la viscosité de l'espèce  $s$

$$\mu_s = 0.1 \exp((A_s \ln T + B_s) \ln T + C_s) \quad (\text{en kg/ms})$$

Les valeurs de  $A_s$ ,  $B_s$  et  $C_s$  se trouvent dans l'annexe.

La conductivité thermique des températures de translation-rotation de chaque espèce est calculée par la relation d'Eucken

$$\kappa_s = \mu_s \left( \frac{5}{2} c_{v_{tr,s}} + c_{v_{rot,s}} \right)$$

Avec ces quantités, on calcule un terme de viscosité et de conductivité thermique pour le mélange en appliquant la règle de Wilke

$$\mu = \sum_{s=1}^5 \frac{X_s \mu_s}{\Phi_s} \quad \text{et} \quad \kappa = \sum_{s=1}^5 \frac{X_s \kappa_s}{\Phi_s}$$

avec

$$X_s = \frac{Y_s \bar{m}}{\bar{m}_s} \quad \bar{m} = \left( \sum_{s=1}^5 \frac{Y_s}{\bar{m}_s} \right)^{-1}$$

$$\Phi_s = \sum_{r=1}^5 X_r \left( 1 + \sqrt{\frac{\mu_s}{\mu_r}} \left( \frac{\bar{m}_r}{\bar{m}_s} \right)^{\frac{1}{4}} \right)^2 \left( \sqrt{8 \left( 1 + \frac{\bar{m}_s}{\bar{m}_r} \right)} \right)^{-1}$$

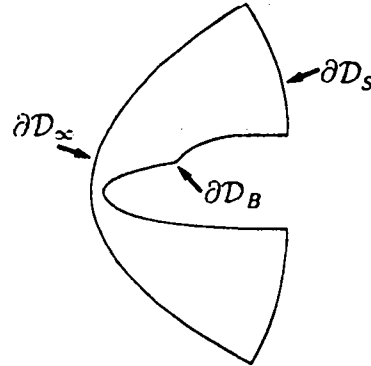
Le coefficient de diffusion  $D_s$  est calculé en supposant que le nombre de Lewis,  $Le$ , est constant et généralement pris égal à 1

$$\forall s, \quad D_s = \frac{Le \kappa}{\rho c_p}$$

Avec cette définition, toutes les espèces ont le même coefficient de diffusion  $D$ .

### 2.3 Les conditions au bord

Nous étudions des écoulements externes autour d'engins pour lesquels le domaine étudié est toujours du même type.



Le bord du domaine se décompose en trois parties  $\partial D = \partial D_\infty \cup \partial D_S \cup \partial D_B$

- $\partial D_\infty$  est le bord infini amont du domaine. L'écoulement y est supposé uniforme, non réactif et est défini par les valeurs adimensionnées suivantes

$$\rho_\infty = 1 \quad \vec{V}_\infty = \begin{pmatrix} \cos \alpha \\ \sin \alpha \end{pmatrix} \quad p_\infty = \frac{\rho_\infty \|\vec{V}_\infty\|}{\gamma M_\infty^2}$$

où  $\alpha$  est l'angle d'incidence et  $M_\infty$  est le nombre de Mach du fluide à l'infini.

Les caractéristiques étant toutes rentrantes, il n'y a pas de condition particulière à imposer pour les flux convectifs. Pour les flux visqueux, on impose des conditions de type Neumann.

- $\partial\mathcal{D}_S$  est la partie du bord où l'écoulement sort du domaine. L'écoulement est supersonique excepté dans la couche limite, près de la paroi. Le traitement des termes convectifs y est délicat et sera détaillé ultérieurement. Pour les flux visqueux, on applique également une condition de type Neumann.
- $\partial\mathcal{D}_B$  est la paroi de l'obstacle sur laquelle on applique des conditions d'adhérence, de paroi isotherme et de paroi non catalytique. On a donc une condition de Dirichlet homogène sur la vitesse

$$\vec{V} = 0$$

et une condition de Dirichlet non homogène sur la température

$$T = T_b$$

Ces deux conditions sont appliquées à travers une formulation forte. Pour les espèces, on applique une condition de Neumann.

## 2.4 Les conditions initiales

On s'intéresse ici aux solutions stationnaires de (1). La condition initiale est donc arbitraire.

En général, la condition initiale est l'écoulement infini uniforme dans tout le domaine

$$W(\vec{x}, 0) = W_0(\vec{x}) = W_\infty, \quad \forall \vec{x} \in \mathcal{D}$$

Cependant, dans certains cas difficiles (forte incidence par exemple), il est souhaitable de prendre comme condition initiale, un écoulement plus proche de la solution stationnaire que l'écoulement uniforme. La condition initiale peut alors être une solution sans réaction chimique pour laquelle le choc est déjà formé (même s'il est mal placé).

## 3 L'adimensionnement des équations

On souhaite utiliser lors des calculs, des variables adimensionnées comme cela est classiquement fait pour des écoulements non réactifs [8]. La solution dépend fortement de la taille réelle de l'engin. De plus, le calcul du terme source, de la viscosité et de la conductivité thermique nécessitent des valeurs dimensionnées de la température (en Kelvin), de la masse volumique (en  $kg/m^3$ )...

Il nous faut donc définir un système de dimensionnements afin de calculer les

valeurs adimensionnées de ces quantités.

Les valeurs dimensionnées des quantités thermodynamiques de l'atmosphère sont données par l'altitude

$$\tilde{\rho}_\infty \quad \tilde{p}_\infty \quad \tilde{T}_\infty \quad \tilde{u}_\infty$$

et la vitesse

$$\tilde{u}_\infty$$

par le nombre de Mach à l'infini  $M_\infty$ .

On impose des quantités adimensionnées à l'infini

$$\rho_\infty \quad u_\infty \quad p_\infty$$

ce qui nous permet de définir des coefficients de dimensionnement

$$\dim \rho = \frac{\tilde{\rho}_\infty}{\rho_\infty} \quad \dim u = \frac{\tilde{u}_\infty}{u_\infty}$$

On définit également une échelle de longueur

$$\tilde{x} = x \cdot \dim x$$

dont l'introduction entraîne naturellement celle d'une échelle de temps

$$\tilde{t} = \frac{\dim x}{\dim u} \cdot t$$

En substituant ces quantités dans les équations aux dérivées partielles dimensionnées, on obtient l'expression adimensionnée du terme source

$$\Omega = \frac{\dim x}{\dim \rho \cdot \dim u} \tilde{\Omega}$$

ainsi que de la viscosité, du terme de diffusion et de la conductivité thermique

$$\mu = \dim \rho \cdot \dim u \cdot \dim x \cdot \tilde{\mu}$$

$$D = \dim u \cdot \dim x \cdot \tilde{D}$$

$$\kappa = \dim \rho \cdot \dim u \cdot \dim x \cdot \tilde{\kappa}$$

Cette méthode permet d'obtenir les valeurs adimensionnées de ces termes sans en modifier le calcul, qui est complexe.

Les variables conservatives utilisées sont adimensionnées, seule la température est dimensionnée et l'on utilise l'ensemble des dimensionnements pour passer d'un état à l'autre lors du calcul de  $\Omega$ ,  $\mu$ ,  $\kappa$ ,  $D$  et de la température (par l'équation d'énergie).

Il semblerait plus naturel de travailler en variables dimensionnées mais cette méthode permet, par l'introduction de l'échelle de longueur  $\dim x$ , d'effectuer des calculs sur des géométries de taille très diverses en utilisant un seul maillage,  $\dim x$  étant un rapport d'homothétie [10].

## 4 L'approximation spatiale

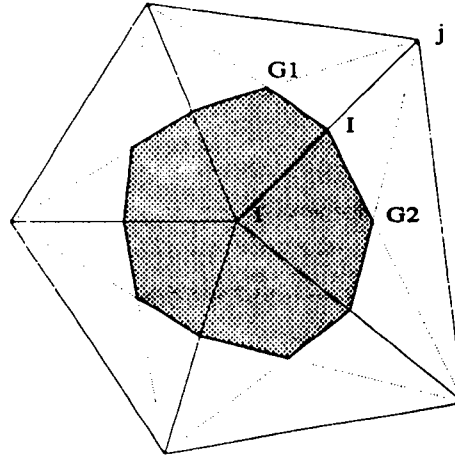
Le domaine de calcul  $\mathcal{D}$  est approché par  $\mathcal{D}_h$  discrétisé en Eléments Finis triangulaires. Si  $\tau_h$  est cette triangulation et que le nombre de triangles est  $N_T$ , on obtient un premier recouvrement du domaine  $\mathcal{D}_h$

$$\mathcal{D}_h = \bigcup_{j=1}^{N_T} T_j, \quad T_j \in \tau_h$$

Les  $N_S$  noeuds du maillage sont les sommets des triangles de  $\tau_h$ .

Pour chaque noeud  $N_i$ , on définit une cellule, ou volume de contrôle  $C_i$ , en joignant successivement les centres de gravité des triangles ayant  $i$  pour sommet et les milieux des cotés adjacents à  $N_i$ . On obtient ainsi un second recouvrement de  $\mathcal{D}_h$

$$\mathcal{D}_h = \bigcup_{i=1..N_S} C_i$$



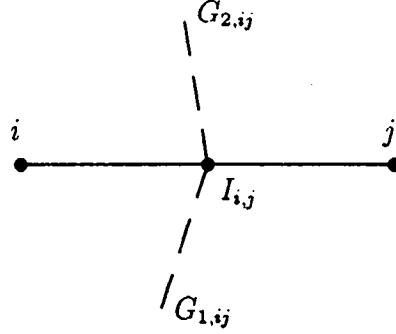
Cellule  $C_i$

Si l'on désigne par  $V(i)$  l'ensemble des noeuds voisins de  $i$ , c'est à dire reliés à  $i$  par un seul segment, la frontière  $\partial C_i$  de la cellule  $C_i$  est

$$\partial C_i = \bigcup_{j \in V(i)} C_i \cap C_j$$

et chaque interface entre deux cellules  $C_i \cap C_j$  est un bisegment du type représenté ci-contre





$$\partial C_{i,j} = [G_{1,i,j}; I_{i,j}] \cup [I_{i,j}; G_{2,i,j}]$$

On applique une formulation variationnelle mixte Volumes Finis-Eléments Finis. Au temps  $t$  fixé, on intègre les équations (1) sur le domaine  $\mathcal{D}_h$  après multiplication par les fonctions test:

- pour les flux convectifs, les fonctions test sont les fonctions caractéristiques des cellules  $C_i$

$$\varphi_i(x, y) = \begin{cases} 1 & \text{si } (x, y) \in C_i \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

- pour les flux diffusifs, les fonctions test sont les fonctions de base P1 des sommets  $i$

$$\psi_i(x, y) = \begin{cases} 1 & \text{en } i \\ 0 & \text{sur tout autre sommet} \end{cases}$$

Ces fonctions de base sont continues, linéaires sur chaque triangle et ont pour support

$$S_i = \bigcup_{T, i \in T} T$$

On intègre les différents termes de l'équation (1) sur leurs supports respectifs, et l'on approche le problème continu par le problème discret sur  $\mathcal{D}_h \times [0, t]$  suivant

$\forall i = 1, \dots, N_S$

$$\begin{aligned} & \int \int_{C_i} \left[ \frac{\partial W}{\partial t}(x, y, t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}(W)(x, y, t) \right] dx dy = \\ & \int \int_{S_i} \left[ \frac{\partial R}{\partial x}(W) + \frac{\partial S}{\partial y}(W) \right] (x, y, t) \psi_i(x, y) dx dy + \int \int_{C_i} [\Omega(W)(x, y, t)] dx dy \end{aligned} \quad (2)$$

### 4.1 Le calcul des flux convectifs

Après intégration par parties et décomposition du contour  $\partial C_i$  en interfaces entre deux cellules, l'intégrale des flux convectifs s'écrit

$$\int_{\partial C_i} \vec{\mathcal{F}}(W) \cdot \vec{n} \, d\sigma = \sum_{j \in V(i)} \int_{\partial C_i \cap \partial C_j} \vec{\mathcal{F}}(W) \cdot \vec{n}_{ij} \, d\sigma + \int_{\partial \mathcal{D} \cap \partial C_i} \vec{\mathcal{F}}(W) \cdot \vec{n}_i \, d\sigma$$

Le calcul détaillé des termes de bord  $\int_{\partial \mathcal{D} \cap \partial C_i} \vec{\mathcal{F}}(W) \cdot \vec{n}_i \, d\sigma$  sera donné plus loin.

Les flux internes

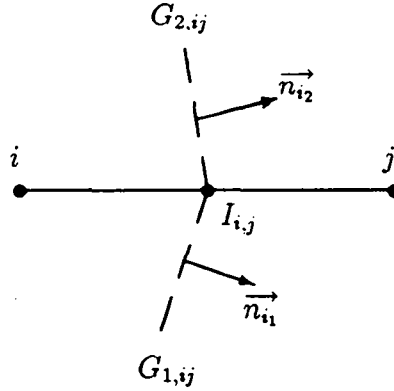
$$\int_{\partial C_i \cap \partial C_j} \vec{\mathcal{F}}(W) \cdot \vec{n}_{ij} \, d\sigma$$

sont calculés à partir d'un schéma décentré: le flux à travers l'interface  $\partial C_i \cap \partial C_j$  est évalué à l'aide d'une fonction de flux numérique

$$\int_{\partial C_i \cap \partial C_j} \vec{\mathcal{F}}(W) \cdot \vec{n}_{ij} \, d\sigma = \Phi(W_i, W_j, \vec{\eta}_{ij})$$

$\vec{\eta}_{ij}$  étant la normale intégrée sortante à l'interface

$$\vec{\eta}_{ij} = \int_{\partial C_i \cap \partial C_j} \vec{n}_{ij} \, d\sigma = \|\overrightarrow{G_{1,ij}; I_{i,j}}\| \vec{n}_{i1} + \|\overrightarrow{I_{i,j}; G_{2,ij}}\| \vec{n}_{i2}$$



#### 4.1.1 L'extension à l'ordre deux

Pour étendre la précision spatiale à l'ordre deux, on utilise la méthode M.U.S.C.L. (Monotonic Upwind Schemes for Conservation Laws) introduite par B. van Leer [24], [25] et étendue au cas des Eléments Finis par L. Fezoui [6]. Cette méthode consiste en deux points:

• Pour augmenter la précision spatiale, on élève le degré de l'interpolation de l'inconnue  $W$  à l'aide des gradients de la solution aux nœuds du maillage. Un des avantages de cette méthode est que la fonction de flux numérique est inchangée, seuls ses arguments sont différents.

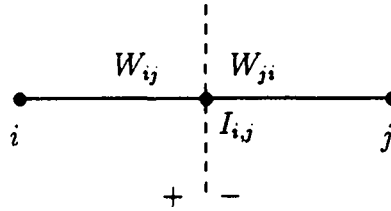
• Il faut introduire des techniques de limitation des gradients approchés afin d'atténuer les éventuelles oscillations numériques. On espère ainsi obtenir un schéma T.V.D. (Total Variation Diminishing).

Le flux à l'interface entre  $i$  et  $j$  s'écrit à présent

$$\int_{\partial C_i \cap \partial C_j} \vec{\mathcal{F}}(W) \cdot \vec{n}_{ij} d\sigma = \Phi(W_{ij}, W_{ji}, \vec{\eta}_{ij})$$

avec

$$W_{ij} = W_{I_{ij}^-} \quad \text{et} \quad W_{ji} = W_{I_{ij}^+}$$

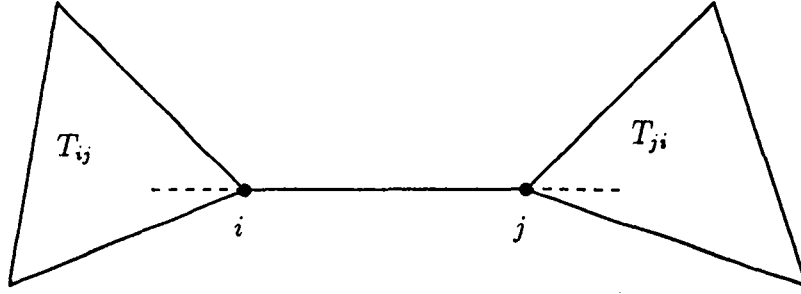


Il existe plusieurs manières d'approcher les gradients aux nœuds du maillage et de nombreuses techniques de limitation [7] mises au point pour les équations d'Euler mais elles ne s'appliquent pas toutes au cas d'un écoulement hypersonique réactif pour lequel le choc est très fort.

L'expérience a montré, qu'il était préférable de calculer des gradients et d'appliquer des limiteurs sur les variables physiques  $(\rho, u, v, p)^T$  et de déduire de ces valeurs interpolées les valeurs des variables conservatives nécessaires au calcul des flux. Cependant, dans notre cas, l'utilisation des variables physiques  $(\rho, u, v, p, Y_1, Y_2, Y_3)^T$  n'a pas permis un contrôle suffisant de la température provoquant des oscillations et des valeurs négatives [9]. Il a donc fallu soit remplacer la pression par la température, méthode efficace mais très coûteuse, l'équation d'énergie étant non linéaire en température, soit la remplacer par l'énergie interne spécifique  $\varepsilon$ , méthode déjà utilisée par J.L. Montagné [17] pour des écoulements à l'équilibre chimique, et qui s'est avérée beaucoup plus économique. C'est cette seconde solution que nous avons choisie. Le passage à l'ordre deux est donc fait sur les variables physiques

$$Z = (\rho, u, v, \varepsilon, Y_1, Y_2, Y_3)^T$$

Nous appliquons la méthode du triangle amont. Pour un segment  $[i, j]$ , on peut définir un triangle amont  $T_{ij}$  et un triangle aval  $T_{ji}$ , construits en prenant les deux triangles interceptant le prolongement de l'arête  $[i, j]$



Une interpolation totalement décentrée est obtenue en prenant pour gradient en  $i$  celui calculé dans le triangle amont  $T_{ij}$  ainsi

$$Z_{ij} = Z_i + \frac{1}{2} \vec{\nabla} Z_{T_{ij}} \cdot \vec{ij} \quad \text{et} \quad Z_{ji} = Z_j - \frac{1}{2} \vec{\nabla} Z_{T_{ji}} \cdot \vec{ij}$$

Les corrections apportées à la valeur au nœud  $i$  par un schéma totalement décentré et un schéma centré sont respectivement

$$C_{TD} = \frac{1}{2} \vec{\nabla} Z_{T_{ij}} \cdot \vec{ij} \quad \text{et} \quad C_C = \frac{1}{2} (Z_j - Z_i)$$

Le schéma "demi-totalement décentré" est alors obtenu en posant

$$Z_{ij} = Z_i + \text{MOY}(C_{TD}, C_C)$$

où  $\text{MOY}$  représente une fonction de moyenne.

Si l'on utilise la moyenne arithmétique, l'approximation obtenue n'est pas suffisamment robuste. Afin de construire un schéma de type T.V.D., on choisit la moyenne de van Albada-van Leer [23]

$$\begin{aligned} \text{MOY}(A, B) &= \frac{(A^2 + \epsilon) B + (B^2 + \epsilon) A}{A^2 + B^2 + 2\epsilon} & \text{si } AB > 0 \\ &= 0 & \text{sinon} \end{aligned}$$

où  $\epsilon$  est un nombre petit positif destiné à éviter les divisions par zéro.

#### 4.1.2 La décomposition de flux de van Leer

La décomposition de flux de van Leer [26] nous conduit au schéma suivant

$$\Phi(U, V) = F_{vl}^+(U) + F_{vl}^-(V)$$

Les expressions des flux  $F_{vl}^+$  et  $F_{vl}^-$  (dans le cas monodimensionnel) sont:

$$F_{vl}^+ = \begin{pmatrix} F & \text{si } u \geq c \\ \begin{pmatrix} \frac{\rho c}{4} \left(\frac{u}{c} + 1\right)^2 = f_1^+ \\ \frac{f_1^+}{\gamma} [(\gamma - 1)u + 2c] \\ \frac{f_1^+}{2(\gamma^2 - 1)} [(\gamma - 1)u + 2c]^2 \end{pmatrix} & \text{si } -c < u < c \\ 0 & \text{sinon} \end{pmatrix}$$

$$F_{vl}^- = \begin{pmatrix} 0 & \text{si } u \geq c \\ \begin{pmatrix} -\frac{\rho c}{4} \left(\frac{u}{c} - 1\right)^2 = f_1^- \\ \frac{f_1^-}{\gamma} [(\gamma - 1)u - 2c] \\ \frac{f_1^-}{2(\gamma^2 - 1)} [(\gamma - 1)u - 2c]^2 \end{pmatrix} & \text{si } -c < u < c \\ F & \text{sinon} \end{pmatrix}$$

Dans le cas bidimensionnel, le flux est calculé monodimensionnellement en se plaçant dans le repère de l'interface par une rotation appropriée. Ainsi

$$\vec{\mathcal{F}}(W, \vec{n}) = \|\vec{n}\| (R^{-1} \circ F)(R(W))$$

Dans le cas de la décomposition de flux de van Leer, l'extension de son expression au cas d'un mélange de gaz réactifs est évidente. En effet

$$F(\rho Y) = Y F(\rho)$$

le flux des espèces se décompose donc de la façon suivante

$$\Phi(\rho Y)_{i+\frac{1}{2}}^n = Y_i^n F_{vl}^+(\rho_i^n) + Y_{i+1}^n F_{vl}^-(\rho_{i+1}^n) \quad (3)$$

Cette méthode s'applique à toutes les décompositions de flux et aux solveurs de Riemann approchés pour lesquels l'extension à un mélange de gaz réactifs nécessiterait le calcul de matrices jacobienues très coûteux comme l'a montré B. Larrouturou pour des problèmes appliqués à la combustion [16]. De plus, cette méthode respecte le Principe du Maximum, c'est à dire dans notre cas, l'appartenance des fractions massiques à l'intervalle  $[0;1]$ .

Nous avons choisi une méthode découplée résolvant séparément les parties aérodynamique (équations d'Euler) et chimique (bilan d'espèces) mais le calcul des flux des espèces par (3) s'est avéré indispensable; les flux ainsi obtenus, sont identiques à ceux d'une méthode globale (un seul système regroupant toutes

les équations) ce qui renforce le couplage et cette méthode est très simple à implémenter.

Pour calculer le terme  $\gamma$  qui apparait dans la décomposition de flux, on applique la méthode du  $\gamma$  équivalent [11]. Cette méthode consiste à définir un "gamma mathématique"  $\hat{\gamma}$  vérifiant en chaque noeud l'équation d'état des gaz parfaits

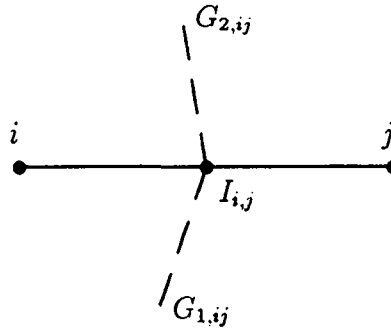
$$p = (\gamma - 1) \left( E - \frac{1}{2} \rho \|\vec{U}\|^2 \right)$$

Cette méthode permet d'utiliser les mêmes expressions des flux  $F^+$  et  $F^-$  que dans le cas d'un gaz parfait, sans problème d'inconsistance.

#### 4.1.3 Ordre deux avec recentrage à la paroi

Dans le cas d'écoulements visqueux, si la décomposition de van Leer permet une capture très précise des chocs, elle est moins performante pour résoudre les discontinuités de contact. Or, une couche limite avec un cisaillement important et une pression presque constante agit, pour la décomposition de flux, comme une discontinuité de contact. Nous avons donc tenté, dans le cas d'un schéma d'ordre deux, d'améliorer la décomposition de flux de van Leer, près de la paroi,

Cette méthode consiste en l'utilisation de pentes centrées aux interfaces mettant en jeu au moins un point de la paroi. Pour les autres interfaces, on obtient une approximation d'ordre deux en appliquant le schéma demi-totalement décentré défini précédemment. Pour une interface,



on distingue alors deux cas:

- $i$  ou  $j$  est un point de la paroi, on applique alors le schéma centré pour obtenir la valeur des variables physiques au point  $I_{i,j}$

$$Z_{i,j} = Z_{j,i} = \frac{Z_i + Z_j}{2}$$

•  $i$  et  $j$  ne sont pas sur la paroi, on applique, dans ce cas, le schéma demi-totalement décentré

$$Z_{ij} = Z_i + MOY(C_{TD}, C_C)$$

On ne rappelle pas ici les expressions des pentes centrées et totalement décentrées  $C_C$  et  $C_{TD}$  ainsi que la fonction de moyenne qui sont détaillées au paragraphe 4.1.1.

Il faut ajouter que cette méthode ne s'applique qu'aux variables "physiques"  $u$ ,  $v$  et  $\varepsilon$  qui subissent la condition d'adhérence. On verra, dans les résultats numériques, que l'on obtient des oscillations sur une des espèces si l'on utilise des pentes centrées pour l'ensemble complet des variables physiques.

#### 4.1.4 L'extension du flux de van Leer par Hänel

Hänel [13] propose une modification de la décomposition de flux de van Leer spécialement adaptée aux écoulements hypersoniques visqueux. La première particularité est l'utilisation d'une vitesse critique du son

$$c^* = \sqrt{\frac{2(\gamma - 1)}{(\gamma + 1)} H_T}$$

à partir de laquelle on définit un nombre de Mach critique  $M^* = u/c^*$  comme critère de décentrage. Les variations de l'enthalpie totale  $H_T$  étant plus faibles à travers l'écoulement complet que celles de la vitesse du son  $c$ , cette modification associée à une nouvelle formulation du calcul du flux d'énergie augmente la robustesse du code numérique pour des masses volumiques ou des températures faibles, lors de la convergence vers l'état stationnaire. La décomposition de flux s'écrit

$$F_H^\pm(W) = \begin{pmatrix} f_1^\pm = \pm \frac{\rho c^*}{4} \left( \frac{u}{c^*} \pm 1 \right)^2 \\ \frac{f_1^\pm}{\gamma} [(\gamma - 1) u \pm 2 c^*] \\ f_1^\pm v \\ f_1^\pm H \end{pmatrix}$$

#### 4.1.5 Le schéma d'Osher

Le schéma proposé par Osher et Solomon [18] est basé sur l'expression suivante de la fonction de flux numérique

$$\Phi(U, V) = \frac{1}{2} (F(U) + F(V)) + \int_U^V |A(W)| dW$$

L'intégrale est calculée sur un chemin reliant  $U$  et  $V$  dans l'espace d'état. Le chemin d'intégration proposé dans [18] est une courbe tangente par morceaux aux différents vecteurs propres de la matrice Jacobienne du flux  $A$  et l'évaluation de cette intégrale repose sur la connaissance des invariants de Riemann associés à chaque vecteur propre. Un exposé plus détaillé de ce solveur de Riemann approché se trouve dans [18].

L'extension du flux d'Osher aux espèces [16] est obtenue à partir du flux de la variable  $\rho$

$$\Phi((\rho Y)_i, (\rho Y)_j) = \begin{cases} Y_i \Phi_\rho(W_i, W_j) & \text{si } \Phi_\rho > 0 \\ Y_j \Phi_\rho(W_i, W_j) & \text{sinon} \end{cases}$$

## 4.2 Calcul des flux diffusifs

Nous allons à présent détailler le calcul des flux visqueux

$$\int \int_{S_i} \left[ \frac{\partial R}{\partial x}(W) + \frac{\partial S}{\partial y}(W) \right] (x, y, t) \psi_i(x, y) dx dy$$

On applique la formule de Green et l'on obtient

$$\begin{aligned} & \int \int_{S_i} \left[ \frac{\partial R}{\partial x}(W) + \frac{\partial S}{\partial y}(W) \right] \psi_i dx dy = \\ & - \sum_{T, i \in T} \int \int_T \left[ R(W) \frac{\partial \psi_i}{\partial x} + S(W) \frac{\partial \psi_i}{\partial y} \right] dx dy + \int_{\partial D} [R(W) n_1 + S(W) n_2] d\sigma \end{aligned}$$

$\vec{n} = (n_1, n_2)^t$  étant la normale extérieure à la paroi  $\partial D$ . Le calcul des flux de bord sera abordé ultérieurement.

Une interpolation de type Eléments Finis P1 pour l'approximation spatiale des flux visqueux nous fournit un schéma centré en supposant que les variables physiques intervenant dans les termes visqueux  $u$ ,  $v$ ,  $T$  et les  $Y_s$  sont linéaires dans chaque triangle  $T$ , ainsi

$$\sum_{T, i \in T} \int \int_T \left[ R \frac{\partial \psi_i^T}{\partial x} + S \frac{\partial \psi_i^T}{\partial y} \right] dx dy = \sum_{T, i \in T} \text{aire}(T) \left[ R(T) \frac{\partial \psi_i^T}{\partial x} + S(T) \frac{\partial \psi_i^T}{\partial y} \right]$$

$R(T)$  et  $S(T)$  sont constants sur le triangle  $T$ , on utilise pour cela des moyennes des termes qui apparaissent sans dérivation, la vitesse s'écrit

$$\vec{V}_T = \frac{1}{3} \sum_{i \in T} \vec{V}_i$$

et l'on utilise la même méthode pour définir les valeurs moyennes par triangle  $\kappa_T$ ,  $h_{sT}$ ,  $\rho_T$  et  $D_T$ .



### 4.3 Traitement des termes de bord

#### 4.3.1 La paroi $\partial\mathcal{D}_B$

Sur la paroi, supposée non catalytique, on applique des conditions d'adhérence et de paroi isotherme en formulation forte. Pour un nœud  $i$  situé sur la paroi  $\partial\mathcal{D}_B$ , on évalue d'abord les masses volumiques  $(\rho)_i$  et  $(\rho_s)_i$ , en supposant nuls les flux de masse à travers l'interface  $\partial C_i \cap \partial\mathcal{D}_B$ . L'énergie totale par unité de masse est alors déduite en imposant une énergie cinétique nulle et la température de la paroi.

$$E_i = \sum_{s=1}^5 (\rho_s)_i c_{v,s} T_B + \sum_{s=1}^3 (\rho_s)_i h_s^0 + \sum_{s=3}^5 \frac{(\rho_s)_i R_s \Theta_{v,s}}{e^{\frac{\Theta_{v,s}}{T_B}} - 1}$$

#### 4.3.2 Bords entrants et sortants $\partial\mathcal{D}_\infty$ et $\partial\mathcal{D}_S$

- Pour les flux visqueux, on applique des conditions de type Neumann c'est à dire que l'on considère que les flux numériques correspondants aux termes visqueux sont nuls à travers ces bords.
- Pour les flux convectifs, les conditions sur le bord infini sont immédiates. L'écoulement y est supersonique donc toutes les caractéristiques sont rentrantes et l'état  $W_\infty$  correspond à l'état initial à l'amont du choc.

Par contre pour le bord sortant  $\partial\mathcal{D}_S$ , il convient à présent d'étudier les flux avec soin puisque l'écoulement est subsonique dans la couche limite. Donc, si l'on souhaite utiliser un schéma décentré sur cette paroi, il faut connaître une valeur représentative du champ à l'extérieur. Il est difficile, dans notre cas de prévoir la valeur de ce champ externe. Une manière de contourner cette difficulté est de décentrer en posant

$$\begin{aligned} \Phi_i(W, \vec{n}) &= \mathcal{M}^+(W_i; \vec{n}_i) W_i + \mathcal{M}^-(W_i; \vec{n}_i) W_i \\ &= \vec{\mathcal{F}}(W_i, \vec{n}_i) \end{aligned}$$

## 5 Méthode semi-implicite de résolution

On utilise une approche découplée dans laquelle les parties aérodynamique et chimique son résolues séparément. La variable  $W$  est décomposée en deux

$$W_E = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ E \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad W_C = \begin{pmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \\ \rho_3 \end{pmatrix}$$

On rappelle la notation définie précédemment pour les flux convectifs

$$\int_{\partial C_i} \vec{\mathcal{F}}(W) \cdot \vec{n} \, d\sigma \simeq \Phi_i(W, \vec{\eta}_i)$$

et l'on définit une notation similaire pour les flux diffusifs

$$\int \int_{S_i} \left[ \frac{\partial R}{\partial x}(W) + \frac{\partial S}{\partial y}(W) \right] \psi_i \, dx \, dy = \Psi_i(W)$$

Les termes convectifs et diffusifs sont écrits explicitement, le terme source implicite est linéarisé et l'on utilise pour la dérivée en temps le schéma d'Euler décentré d'ordre un. On obtient alors le schéma semi-implicite suivant:

$$\begin{cases} W_{E_i}^{n+1} = W_{E_i}^n - \frac{\Delta t}{\text{aire}(C_i)} [\Phi_{E_i}(W^n, \vec{\eta}_i) - \Psi_{E_i}(W^n)] \\ (Id_{3 \times 3} - \Delta t \Omega'_i) (W_{C_i}^{n+1} - W_{C_i}^n) = \\ \Delta t \Omega(W_C, T)_i^n - \frac{\Delta t}{\text{aire}(C_i)} [\Phi_{C_i}(W^n, \vec{\eta}_i) - \Psi_{C_i}(W^n)] \end{cases}$$

Le calcul de la matrice jacobienne de  $\Omega$  est détaillé dans l'annexe. Afin de définir, pour chaque noeud, le pas de temps optimal, on ajoute dans la définition de celui-ci la contribution des termes de viscosité. Le terme source  $\Omega$  étant exprimé implicitement, nous utilisons la définition du pas de temps proposée par C. Olivier [8] pour des écoulements visqueux non réactifs

$$\Delta t_i = CFL \times \min_{T, i \in T} \Delta t(T)$$

avec

$$\Delta t(T) = \frac{h^2(T)}{\left( \|\vec{V}_M(T)\| + c_M(T) \right) h(T) + \frac{2\gamma\kappa}{\rho(T) Pr Re}}$$

où  $h(T)$  est la hauteur du triangle,  $V_M$  et  $c_M$  sont les vitesses du fluide et du son moyennes dans le triangle et les nombres sans dimension de Prandtl et de Reynolds sont donnés par

$$Pr = \frac{\mu c_p}{\kappa} \quad \text{et} \quad Re = \frac{\rho U L}{\mu}$$

Cette définition a été proposée pour permettre d'utiliser un nombre de CFL égal à un lors de la résolution d'un problème de tube à choc visqueux par un schéma explicite. Nous avons pu constater, lors des calculs, qu'il nous était possible d'utiliser le même nombre de CFL que lors de calculs précédents d'écoulement réactifs non visqueux (en utilisant le schéma semi-implicite dans les deux cas) [10].

## 6 Résultats numériques

### 6.1 Calculs autour d'un corps arrondi

On réalise, dans un premier temps, une série de calculs d'écoulements autour d'une géométrie très simple de corps arrondi. Afin de capturer les phénomènes qui se produisent près de la paroi, le maillage doit être particulièrement fin dans cette zone. A partir d'un maillage uniforme de 697 nœuds, on obtient, par raffinement statique [19] dans la région subsonique, un second maillage de 1173 nœuds. Celui-ci est de nouveau raffiné dans la zone subsonique et l'on obtient le maillage utilisé pour les calculs, figure 1, qui comprend 4234 nœuds, soit plus de 3500 nœuds dans la région subsonique.

A l'amont, l'écoulement est fixé, il correspond aux conditions de l'atmosphère standard à une altitude de 75 km et un nombre de Mach égal à 25; le rayon du demi-cylindre est de 1 m. La viscosité et la conductivité thermique dimensionnées à l'infini,  $\mu$  et  $\kappa$ , sont calculées à l'aide des quantités thermodynamiques de l'atmosphère standard; le nombre de Reynolds par mètre à l'infini correspondant est égal à 19565. On fixe la température à la paroi à 1500 °K. Les solutions obtenues sont symétriques par rapport à l'axe de symétrie; nous présenterons donc les isovaleurs sur des demi géométries.

Les diverses méthodes de calcul des flux convectifs décrites précédemment sont d'abord comparées en utilisant une approximation d'ordre 1 en espace. On représente, figure 2, les isovaleurs du nombre de Mach ( $\Delta M = 0.5$ ). On ne constate aucune différence visible entre le flux de van Leer et l'extension de Hänel. L'utilisation de la vitesse du son critique  $c^*$  dans le décentrage ne modifie pas, dans notre cas, l'allure des isovaleurs. C'est la conclusion que tirent également P. Lardy et H. Deconinck [15] dans leur comparaison des expressions des flux convectifs pour le calcul d'écoulements coniques. Hänel propose, pour améliorer ces résultats, une décomposition de la vitesse tangentielle aux interfaces. Ce procédé s'apparente, à l'ordre 2, à l'utilisation de pentes centrées à la paroi, que nous proposons ultérieurement; nous ne l'avons donc pas utilisé dans cette étude.

En revanche, le schéma d'Osher est plus précis près de la paroi. Les isovaleurs sont plus rapprochées près du corps.

On retrouve des résultats du même type sur les isovaleurs de la température ( $\Delta T = 500.$ ), figure 3, près de la paroi. Par contre, le pic en température, caractéristique des phénomènes hors-équilibre, que l'on rencontre derrière le choc est mieux capturé par les schémas de Hänel et d'Osher puisque l'on constate une différence de 500 °K sur les maxima.

Le comportement de  $O$ ,  $O_2$  et  $NO$ , figure 4, est identique entre les trois sché-

mas. L'oxygène diatomique  $O_2$  se dissocie complètement dans le choc au profit de  $O$ , présent en grande quantité.  $NO$  atteint son maximum immédiatement derrière le choc puis se dissocie au niveau de la paroi. En revanche, les schémas provoquent des comportements très différents de l'azote  $N$  et  $N_2$ , figure 5. La dissociation de  $N_2$  sur la paroi est très importante avec le schéma d'Osher, produisant une grande quantité de  $N$ : leurs valeurs sont constantes le long du corps. Le schéma de Hänel, pour lequel nous n'avons pas appliqué la décomposition de la vitesse tangentielle, nous fournit les résultats les plus éloignés du schéma d'Osher.  $N_2$  se recombine le long de la paroi. On obtient, par application de la décomposition de flux de van Leer, une dissociation plus faible de  $N_2$  que pour le schéma d'Osher, mais les profils sont également constants le long du corps.

Afin de visualiser la couche limite, nous présentons des profils des variables à la sortie de la géométrie, c'est à dire à  $x$  constant,  $y$  étant représenté en ordonnée. Le maillage raffiné comprend (sur ce profil) 15 points d'ordonnée comprise entre 0.5 (la paroi) et 0.6.

On constate, en examinant les profils du nombre de Mach, figure 6, une première diminution ( $y$  grand) correspondant au choc, plus rapide avec le flux de van Leer, un plateau puis une décroissance brutale correspondant à la couche limite. Les différences entre les trois schémas sont plus visibles sur les profils de la température (figure 6). La variation dans le choc est également plus rapide dans le cas du flux de van Leer. Près de la paroi, la diminution de température obtenue en appliquant le flux d'Osher est plus rapide et plus régulière. La solution provenant du flux de Hänel est la plus éloignée de celle du schéma d'Osher.

L'examen des profils de fractions massiques nous permet d'associer d'abord les comportements de  $O$  et  $O_2$  (figure 7).  $O_2$  se dissocie complètement derrière le choc au profit de  $O$  puisque  $NO$  n'est présent qu'en très faible quantité ( $max \equiv 0.06$ ) dans une mince couche comprise entre le choc et le corps (figure 8). Ces espèces ne variant que dans la région du choc, les trois méthodes conduisent au même résultat près de la paroi. On associe également les comportements de  $N$  et  $N_2$  (figure 9). La dissociation de  $N_2$  au profit de  $N$  se produit près de la paroi, donc les différences entre les trois schémas utilisés sont dans ce cas très importantes. On constate d'ailleurs que le schéma de Hänel est le moins précis des trois pour les espèces. La condition de Neumann à la paroi n'est plus vérifiée à cause de la présence d'une inconsistance.  $N$  et  $N_2$  sont les seules espèces à subir l'influence de la couche limite. On constate en effet une recombinaison de  $N_2$  près de la paroi.

Figure 1: Maillage raffiné deux fois (4234 nœuds)

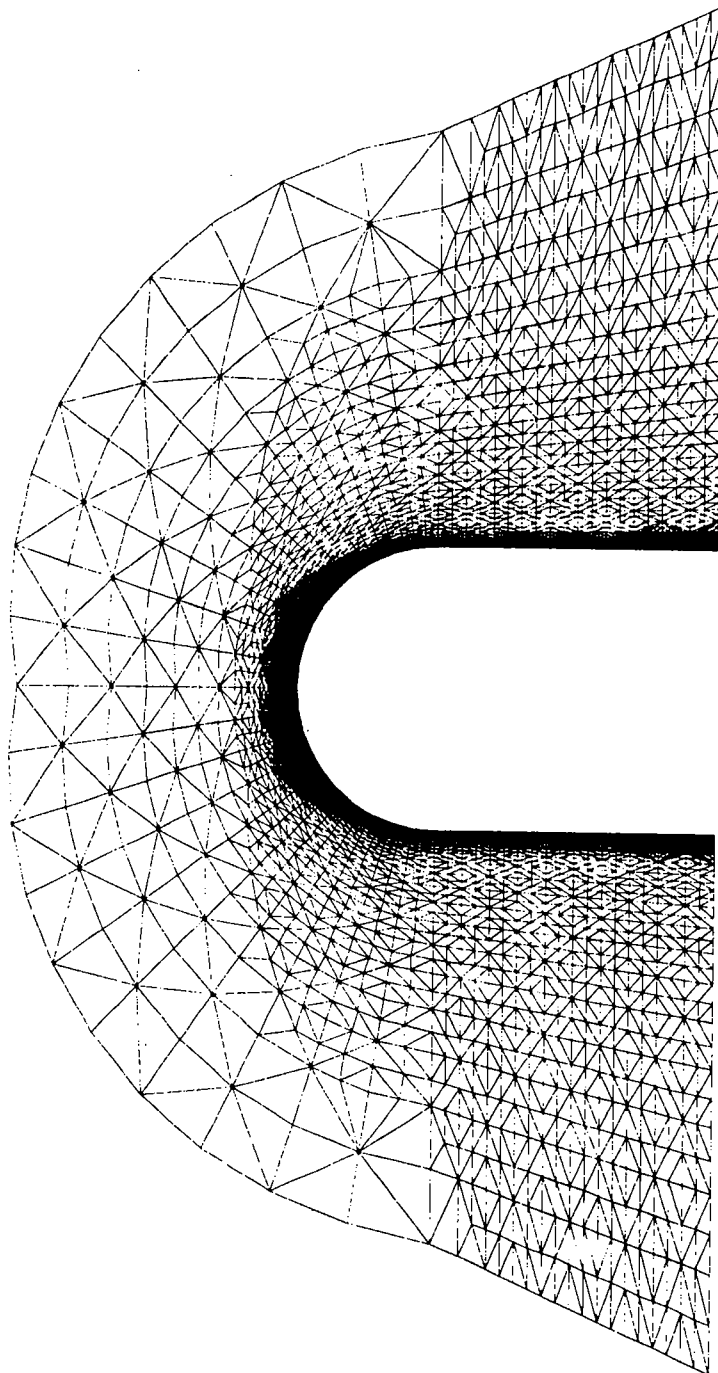
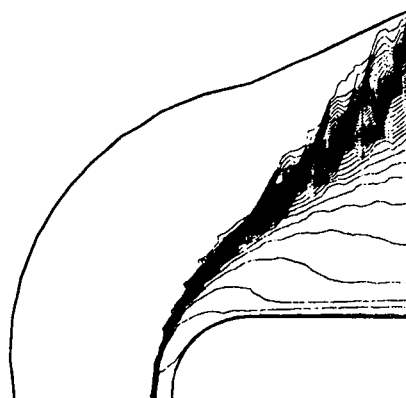
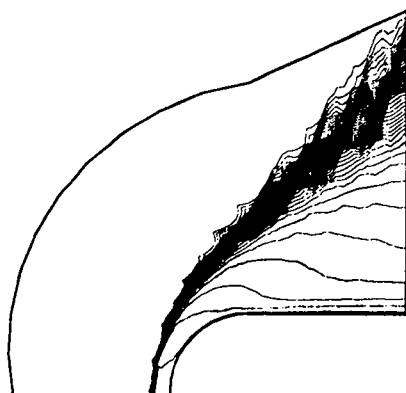


Figure 2: Isovaleurs du nombre de Mach



Flux de van Leer ordre 1



Extension de Hänel ordre 1

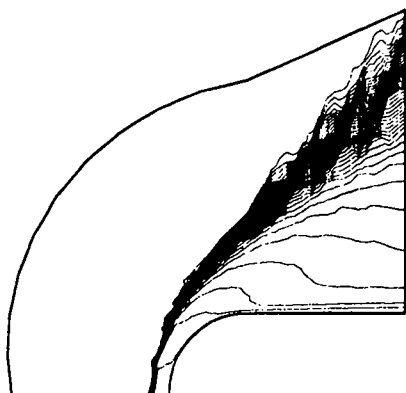
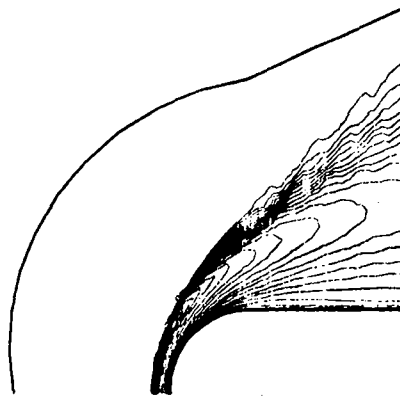
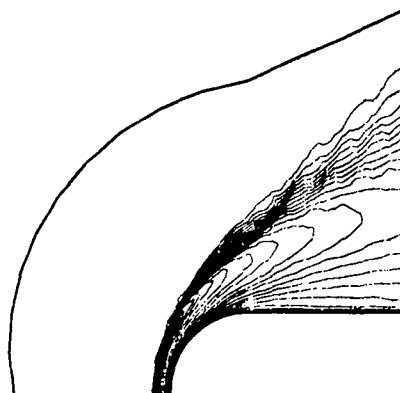


Schéma d'Osher ordre 1

Figure 3: Isovaleurs de la température



Flux de van Leer ordre 1 ( $T_{min} = 204.3^{\circ}\text{K}$  -  $T_{max} = 14262.^{\circ}\text{K}$ )



Extension de Hänel ordre 1 ( $T_{min} = 204.3^{\circ}\text{K}$  -  $T_{max} = 14834.^{\circ}\text{K}$ )

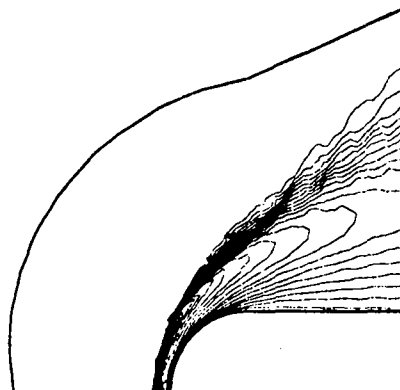
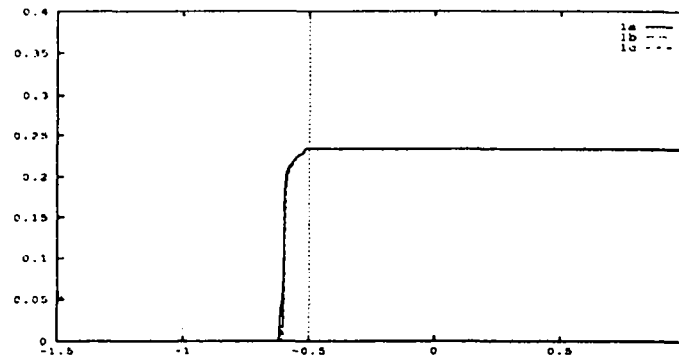
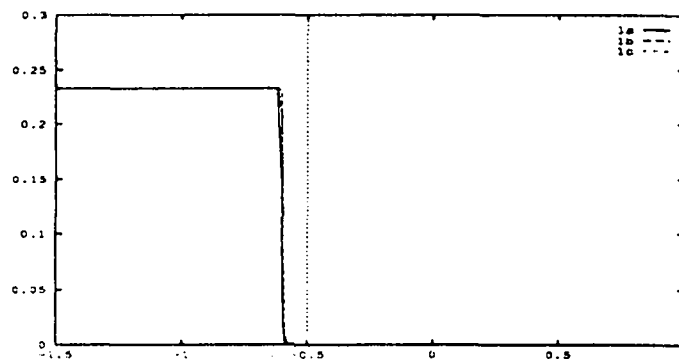
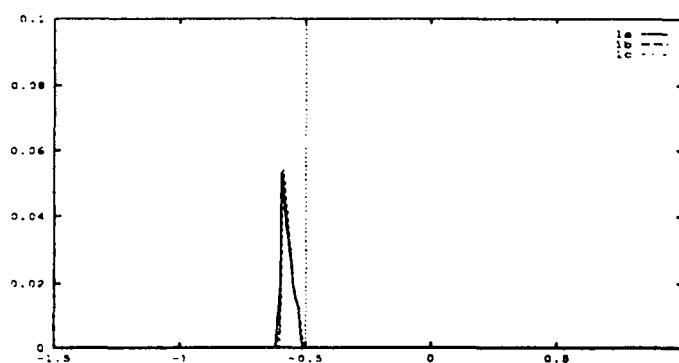
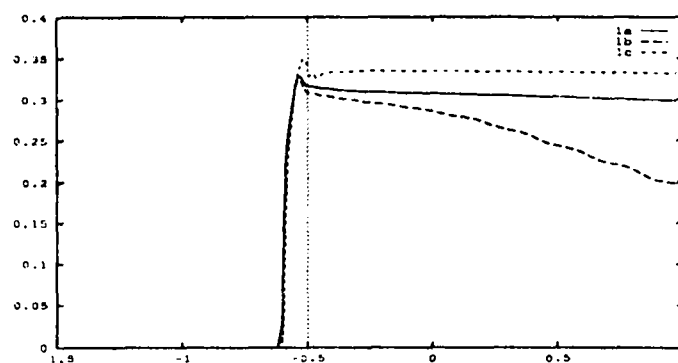
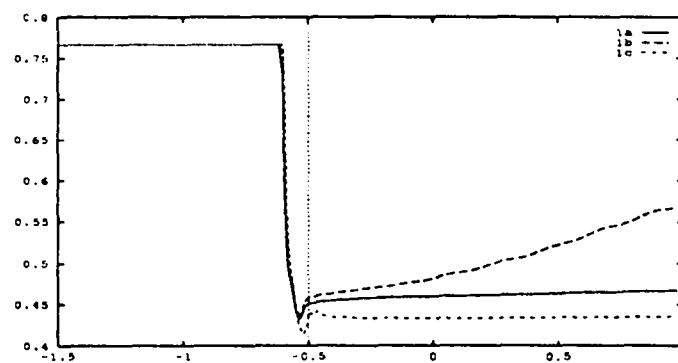


Schéma d'Osher ordre 1 ( $T_{min} = 204.3^{\circ}\text{K}$  -  $T_{max} = 14763.^{\circ}\text{K}$ )

Figure 4: Profils des fractions massiques de  $O$ ,  $O_2$  et  $NO$ Profils de  $O$ Profils de  $O_2$ Profils de  $NO$ 

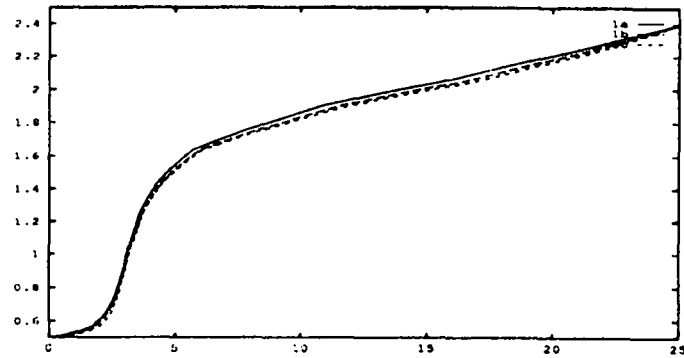
1a: van Leer - 1b: Hänel - 1c: Osher



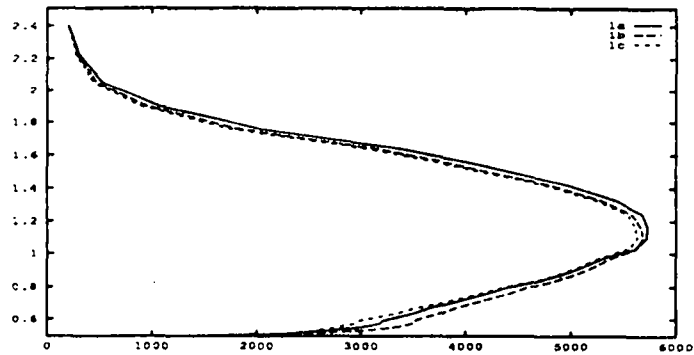
Figure 5: Profils des fractions massiques de  $N$  et  $N_2$ Profils de  $N$ Profils de  $N_2$ 

1a: van Leer - 1b: Hänel - 1c: Osher

Figure 6: Profils en sortie



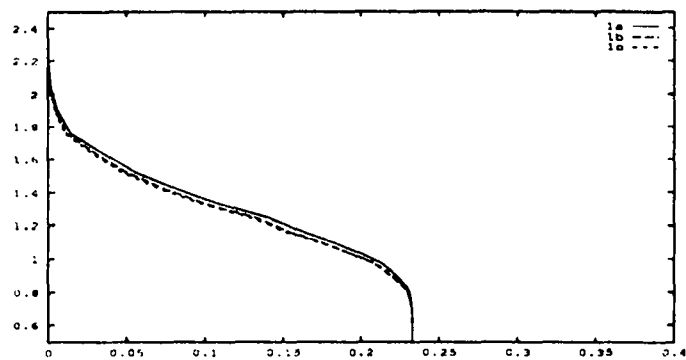
Profils du nombre de Mach



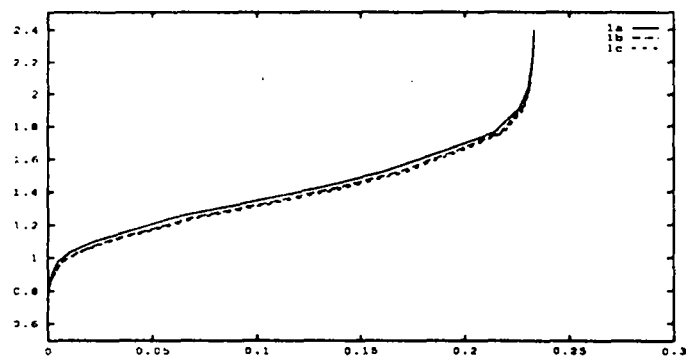
Profils de la température

1a: van Leer - 1b: Hänel - 1c: Osher

Figure 7: Profils en sortie des fractions massiques

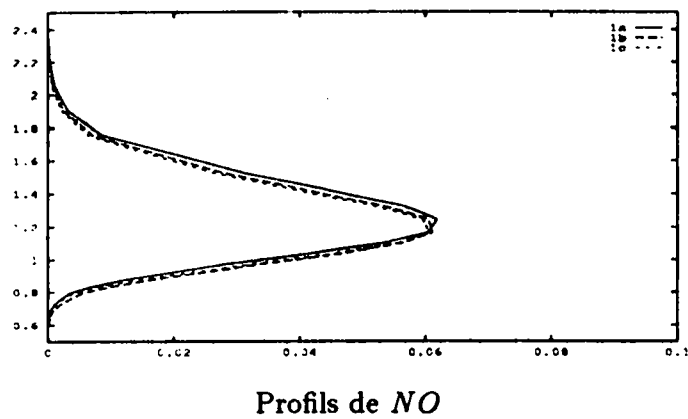


Profils de O

Profils de O<sub>2</sub>

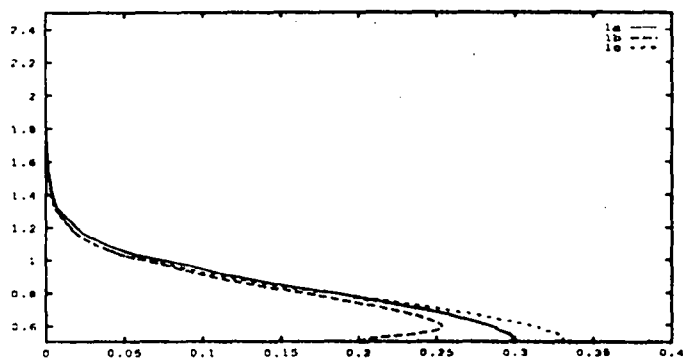
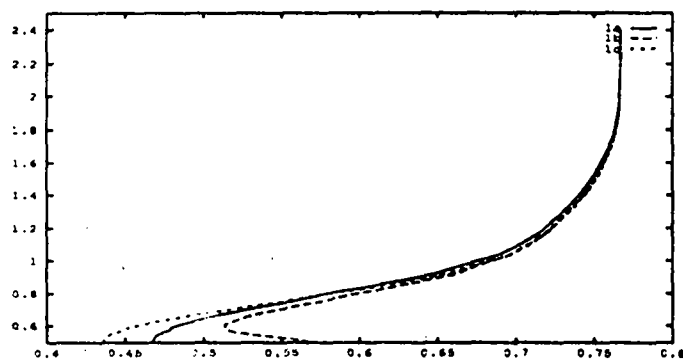
1a: van Leer - 1b: Hänel - 1c: Osher

Figure 8: Profils en sortie des fractions massiques



1a: van Leer - 1b: Hänel - 1c: Osher

Figure 9: Profils en sortie des fractions massiques

Profils de  $N$ Profils de  $N_2$ 

1a: van Leer - 1b: Hänel - 1c: Osher

On étend à présent la précision spatiale à l'ordre 2 par la méthode du triangle amont décrite précédemment. Il n'a pas été possible, même pour une géométrie simple, d'utiliser un schéma d'ordre 2 pour une solution initiale uniforme. Nous sommes donc partis d'une solution d'ordre 1, ce qui rend les calculs très coûteux.

On compare les résultats obtenus en appliquant le flux de van Leer avec et sans recentrage à la paroi et le schéma d'Osher. Une première remarque générale est que les différences entre les solutions d'ordre 1 et d'ordre 2 sont très importantes. Le maillage étant très fin dans la zone subsonique, on ne constate pas de déplacement du choc le long de l'axe de symétrie. En revanche, on note une nette différence sur la partie latérale. A l'ordre 2, le choc s'est rapproché du corps et est moins étalé. La couche limite est mieux capturée et les maxima en température sont plus élevés.

Dans un premier temps, on a tenté d'appliquer la méthode de recentrage à la paroi à toutes les variables physiques que l'on extrapolait à l'ordre 2,  $(\rho, u, v, \varepsilon, Y_1, Y_2, Y_3)$ . Cette méthode provoque des oscillations des fractions massiques à la paroi, même pour un maillage grossier. On représente, figure 10, le profil de  $N$  le long du corps. Ces oscillations disparaissent dès que l'on applique le décentrage uniquement aux variables physiques subissant la condition d'adhérence, c'est à dire  $(u, v, \varepsilon)$ .

Comparons à présent les trois solutions d'ordre 2. On constate, en examinant les isovaleurs du nombre de Mach ( $\Delta M = 0.5$ ), figure 11, une nette différence entre le schéma de van Leer sans recentrage à la paroi et les deux autres méthodes. Ces dernières présentent des isovaleurs plus rapprochées près du corps. Les isovaleurs de la température ( $\Delta T = 500$ ), figure 12, ont le même comportement dans les trois cas et les extrema sont très proches.

Les profils des fractions massiques de  $O$ ,  $O_2$  et  $NO$ , figure 13, sont pratiquement identiques, comme c'était déjà le cas à l'ordre 1. Les variations de  $N$  et  $N_2$  sur la paroi, figure 14, sont similaires pour le schéma de van Leer avec recentrage à la paroi et le schéma d'Osher. En revanche, le flux de van Leer provoque un échange entre  $N_2$  et  $N$  moins important.

Représentons, comme pour les résultats d'ordre 1, les profils des variables à la sortie de la géométrie, pour  $x$  constant. On constate sur le profil du nombre de Mach, figure 15, que le choc est beaucoup plus près du corps qu'à l'ordre 1. Le nombre de Mach est presque constant dans le plateau et la couche limite est mieux capturée. La différence entre le schéma de van Leer sans et avec recentrage à la paroi est nette puisque le profil obtenu par cette dernière méthode est confondu avec celui provenant du schéma d'Osher. Le profil de température, figure 15, présente les mêmes caractéristiques. On remarque une oscillation près de la paroi lorsque l'on utilise le schéma de van Leer classique. Les solutions des deux autres schémas sont identiques.

Les remarques sont les mêmes si l'on examine les profils des fractions massiques (figures 16, 17 et 18). Le schéma de van Leer sans recentrage à la paroi est beaucoup moins précis. Lorsque l'on étudie les profils de  $N$  et  $N_2$ , on constate certaines différences entre les schémas de van Leer avec recentrage et d'Osher, en ce qui concerne les valeurs obtenues sur le corps mais l'allure des courbes est comparable. La condition de Neumann à la paroi est vérifiée dans tous les cas.

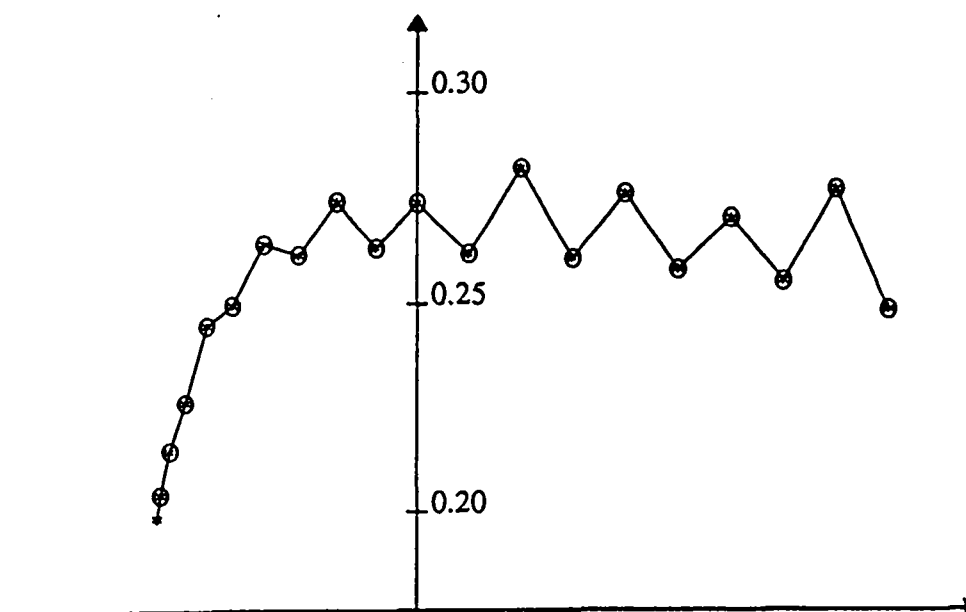
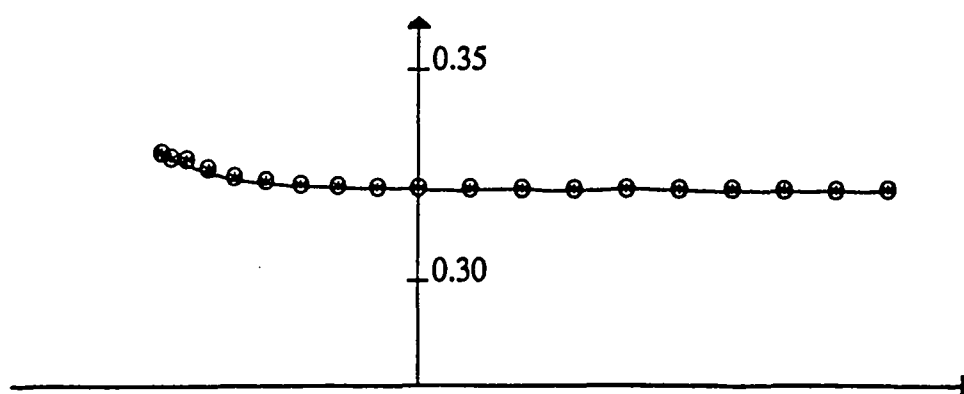
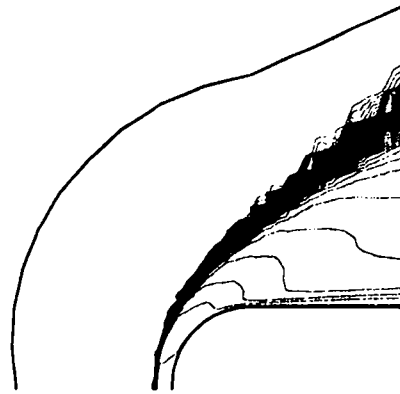
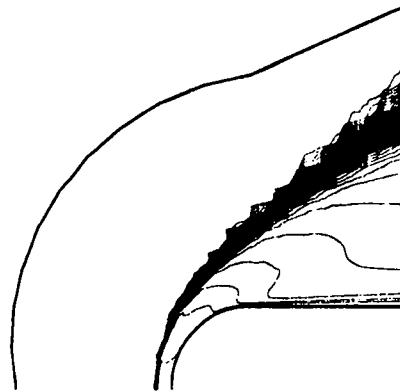
Figure 10: Profils des fractions massiques de  $N$ Recentrage à la paroi sur  $(\rho, u, v, \epsilon, Y_1, Y_2, Y_3)$ Recentrage à la paroi sur  $(u, v, \epsilon)$



Figure 11: Isovaleurs du nombre de Mach



Flux de van Leer ordre 2



Flux de van Leer ordre 2 avec recentrage à la paroi

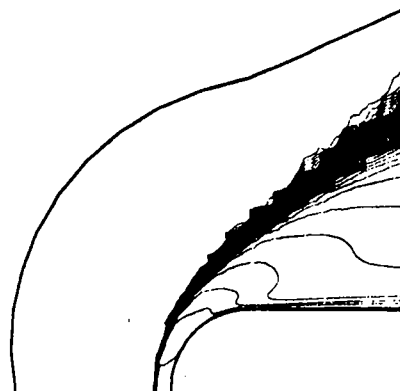
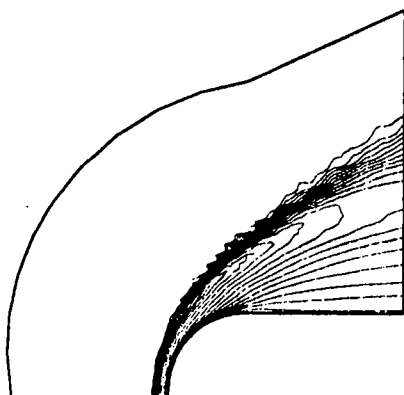


Schéma d'Osher ordre 2

Figure 12: Isovaleurs de la température



Flux de van Leer ordre 2 ( $T_{min} = 204.3^{\circ}\text{K}$  -  $T_{max} = 15072.^{\circ}\text{K}$ )



Flux de van Leer ordre 2 avec recentrage à la paroi  
( $T_{min} = 204.3^{\circ}\text{K}$  -  $T_{max} = 15206.^{\circ}\text{K}$ )

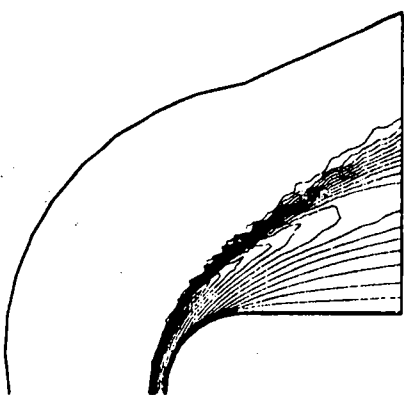
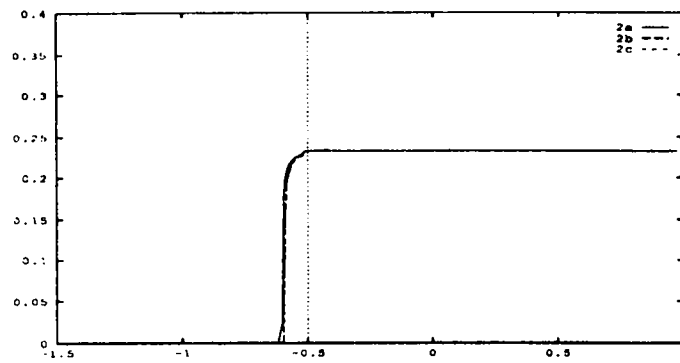
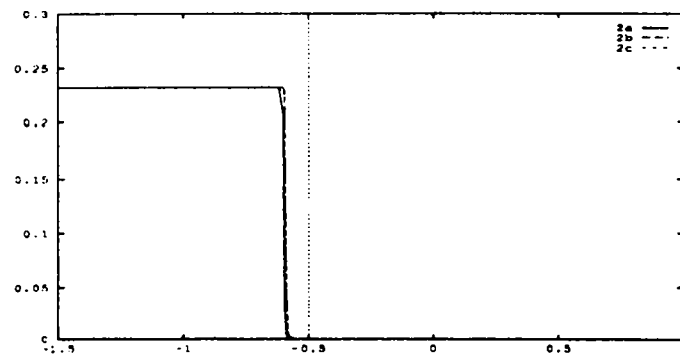
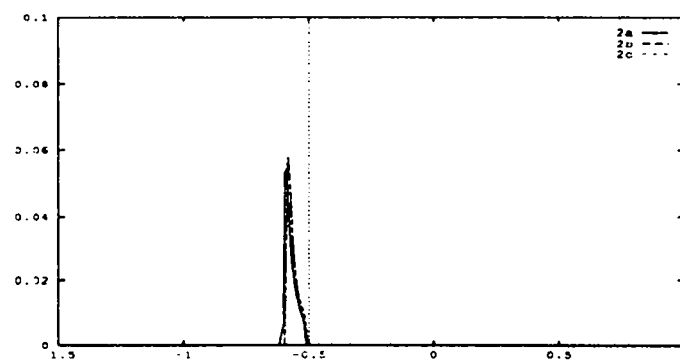
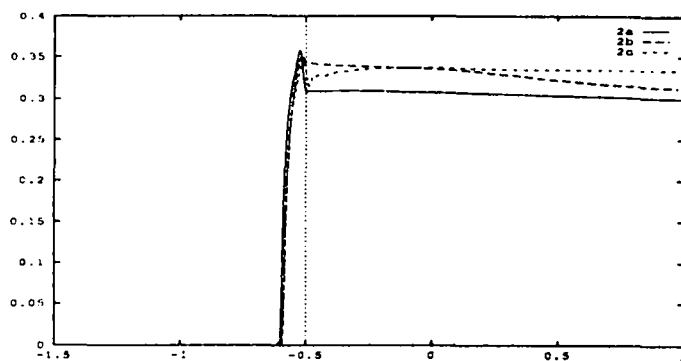
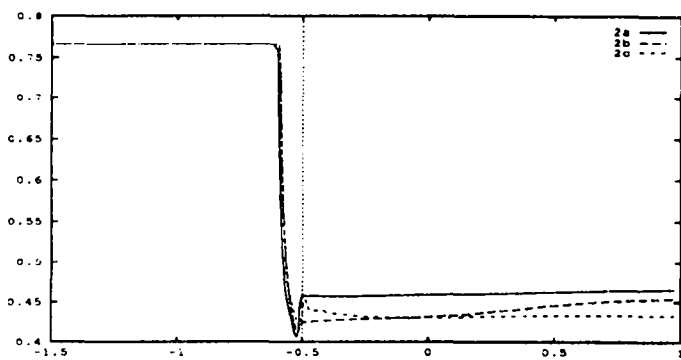


Schéma d'Osher ordre 2 ( $T_{min} = 204.3^{\circ}\text{K}$  -  $T_{max} = 15178.^{\circ}\text{K}$ )

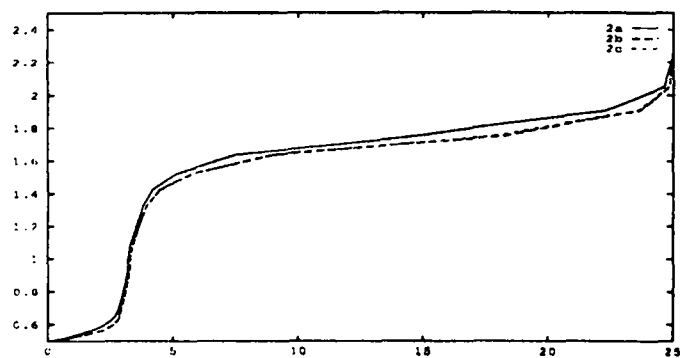
Figure 13: Profils des fractions massiques de  $O$ ,  $O_2$  et  $NO$ Profils de  $O$ Profils de  $O_2$ Profils de  $NO$ 

2a: van Leer - 2b: van Leer avec recentrage à la paroi - 2c: Osher

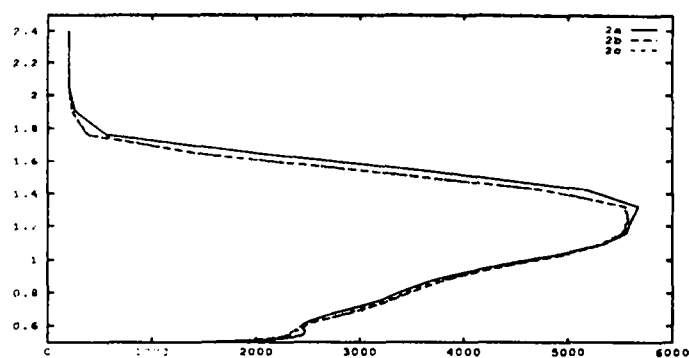
Figure 14: Profils des fractions massiques de  $N$  et  $N_2$ Profils de  $N$ Profils de  $N_2$ 

2a: van Leer - 2b: van Leer avec recentrage à la paroi - 2c: Osher

Figure 15: Profils en sortie



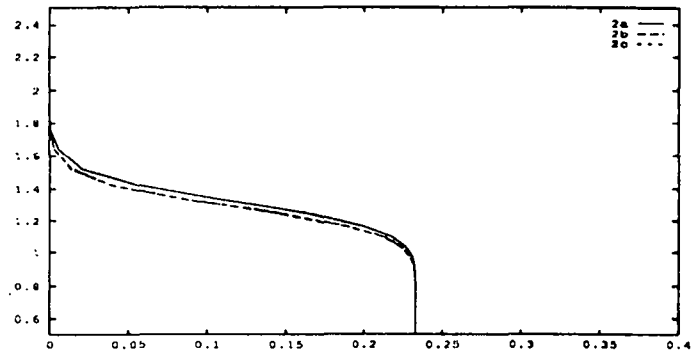
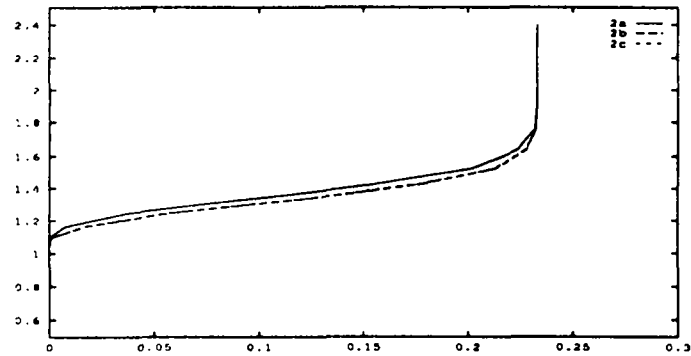
Profils du nombre de Mach



Profils de la température

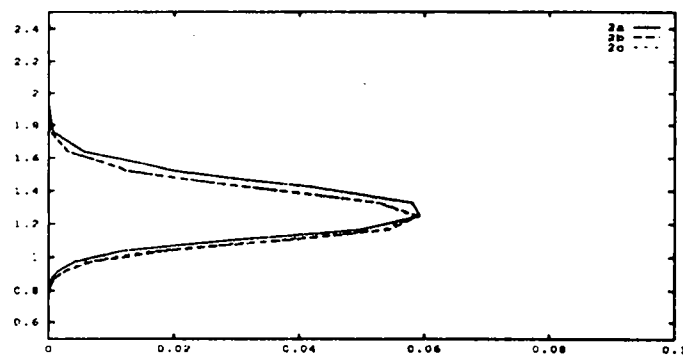
2a: van Leer - 2b: van Leer avec recentrage à la paroi - 2c: Osher

Figure 16: Profils en sortie des fractions massiques

Profils de  $O$ Profils de  $O_2$ 

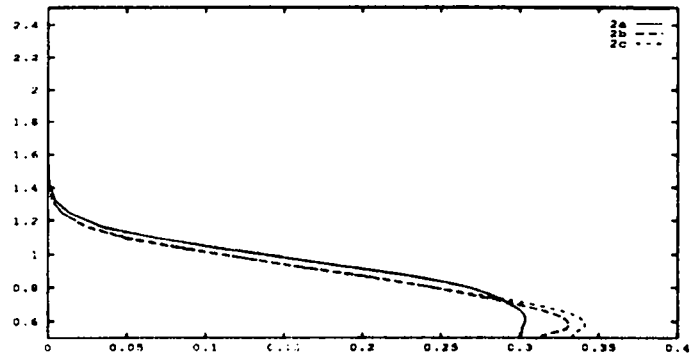
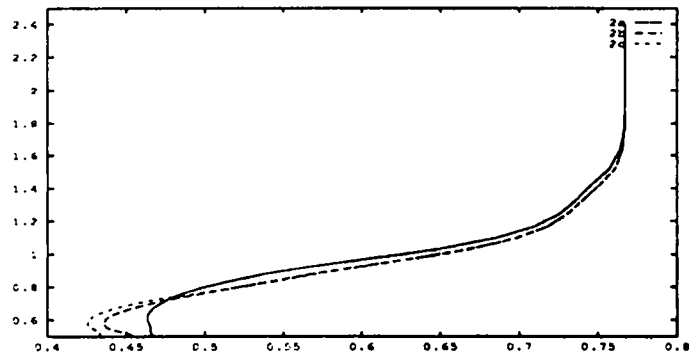
2a: van Leer - 2b: van Leer avec recentrage à la paroi - 2c: Osher

Figure 17: Profils en sortie des fractions massiques

Profils de *NO*

2a: van Leer - 2b: van Leer avec recentrage à la paroi - 2c: Osher

Figure 18: Profils en sortie des fractions massiques

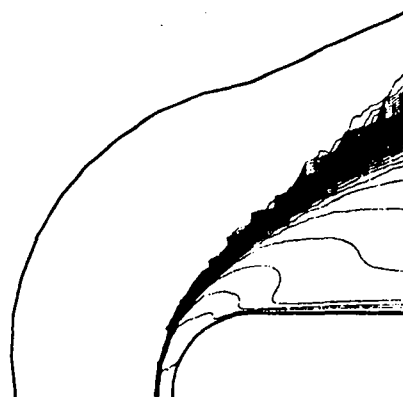
Profils de  $N$ Profils de  $N_2$ 

2a: van Leer - 2b: van Leer avec recentrage à la paroi - 2c: Osher



A partir de ce maillage de 4234 nœuds, on réalise un raffinement supplémentaire dans la zone subsonique et l'on obtient un nouveau maillage contenant 8281 nœuds. On utilise le schéma d'Osher d'ordre 2. Les isovaleurs du nombre de Mach et de la température, figure 19, ne présentent pas de différence visible avec la solution obtenue par ce même schéma et le maillage de 4234 nœuds. On présente, figure 21, les profils en sortie du nombre de Mach et de la température. Il y a maintenant, sur ce profil, 19 points d'ordonnée comprise entre 0.5 et 0.6. La comparaison de ces profils avec les solutions obtenues sur le maillage précédent ne fait apparaître aucune différence visible. Il semble donc que le maillage soit suffisamment raffiné pour nous permettre de capturer les phénomènes de la couche limite.

Figure 19: Isovaleurs du nombre de Mach et de la température



Nombre de Mach

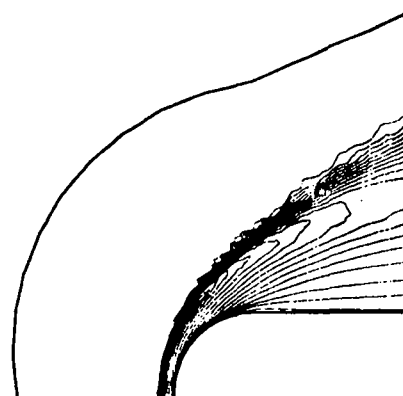
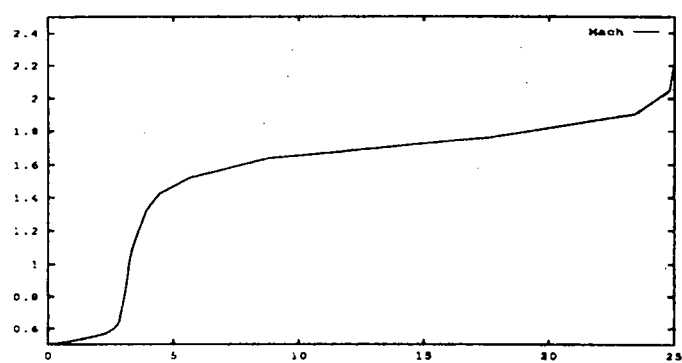
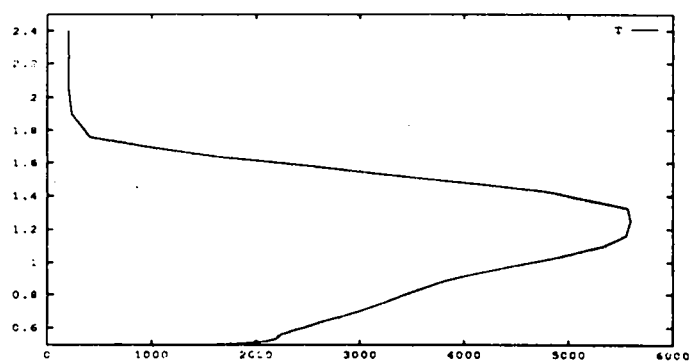
Température ( $T_{min} = 204.3^{\circ}\text{K}$  -  $T_{maz} = 16131.^{\circ}\text{K}$ )

Figure 20: Profils en sortie



Profils du nombre de Mach



Profils de la température

En conclusion, cette étude nous a permis de comparer différents schémas d'approximation des flux convectifs. A l'ordre 1, le schéma d'Osher est visiblement meilleur. En revanche, à l'ordre 2, la méthode du recentrage à la paroi permet de remédier aux inconvénients du schéma de van Leer en étant moins coûteuse que le schéma d'Osher.

## 6.2 Ecoulement à 30° d'incidence

On présente, pour terminer, un écoulement à 30° d'incidence autour d'une double-ellipse modélisant la navette spatiale européenne HERMES. Cette géométrie provient du "Workshop on hypersonic flows for reentry problems" [2] et est définie par les équations suivantes:

$$\left\{ \begin{array}{l} x \leq 0 \\ 0 \leq x \leq 0.016 \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} z \leq 0 \quad \left( \frac{x}{0.06} \right)^2 + \left( \frac{z}{0.015} \right)^2 = 1 \\ z \geq 0 \quad \left( \frac{x}{0.035} \right)^2 + \left( \frac{z}{0.025} \right)^2 = 1 \\ z \leq 0 \quad z = 0.025 \\ z \geq 0 \quad z = -0.015 \end{array} \right.$$

L'altitude est de 75 km et la taille de la double ellipse est dix fois inférieure à celle de la navette HERMES: la longueur de la géométrie est de 0.75 m.

Le maillage de calcul, représenté figure 21, contient 5576 noeuds. Il a été obtenu par raffinement statique [19] dans la zone subsonique à partir d'un maillage régulier de 4257 noeuds. Pour ce calcul, nous utilisons ce maillage raffiné une seule fois; nous n'avons pas, dans le cadre de ce travail, effectué de raffinement supplémentaire. La précision spatiale de cette solution est d'ordre 2 et nous avons utilisé le solveur d'Osher pour l'approximation des flux convectifs.

Les isovaleurs du nombre de Mach sont représentées figure 23. On constate que la solution est régulière. L'influence de la cabine sur l'allure de l'écoulement est très peu visible sur les isovaleurs du nombre de Mach, comparativement au cas d'un écoulement non visqueux [10]. En revanche, on la remarque mieux sur les isovaleurs de la température, figure 23. La température maximale de 16883. °K témoigne de la présence du pic caractéristique du hors-équilibre, la température à la paroi étant de 1500 °K. On constate, sur les profils des fractions massiques produites, figure 24, que la proportion d'oxygène  $O$  est constante sur la paroi. Il en est de même pour  $NO$  qui est complètement dissocié sur le corps. Les variations de  $N$  sont faibles mais on distingue un léger saut au niveau de la cabine. Les valeurs à la paroi sont différentes de celles obtenues dans le cas non visqueux; l'oxygène  $O$  est présent en plus grande quantité, la proportion d'azote  $N$  est plus faible et  $NO$  a totalement disparu.

Figure 21: Maillage raffiné (5576 noeuds)

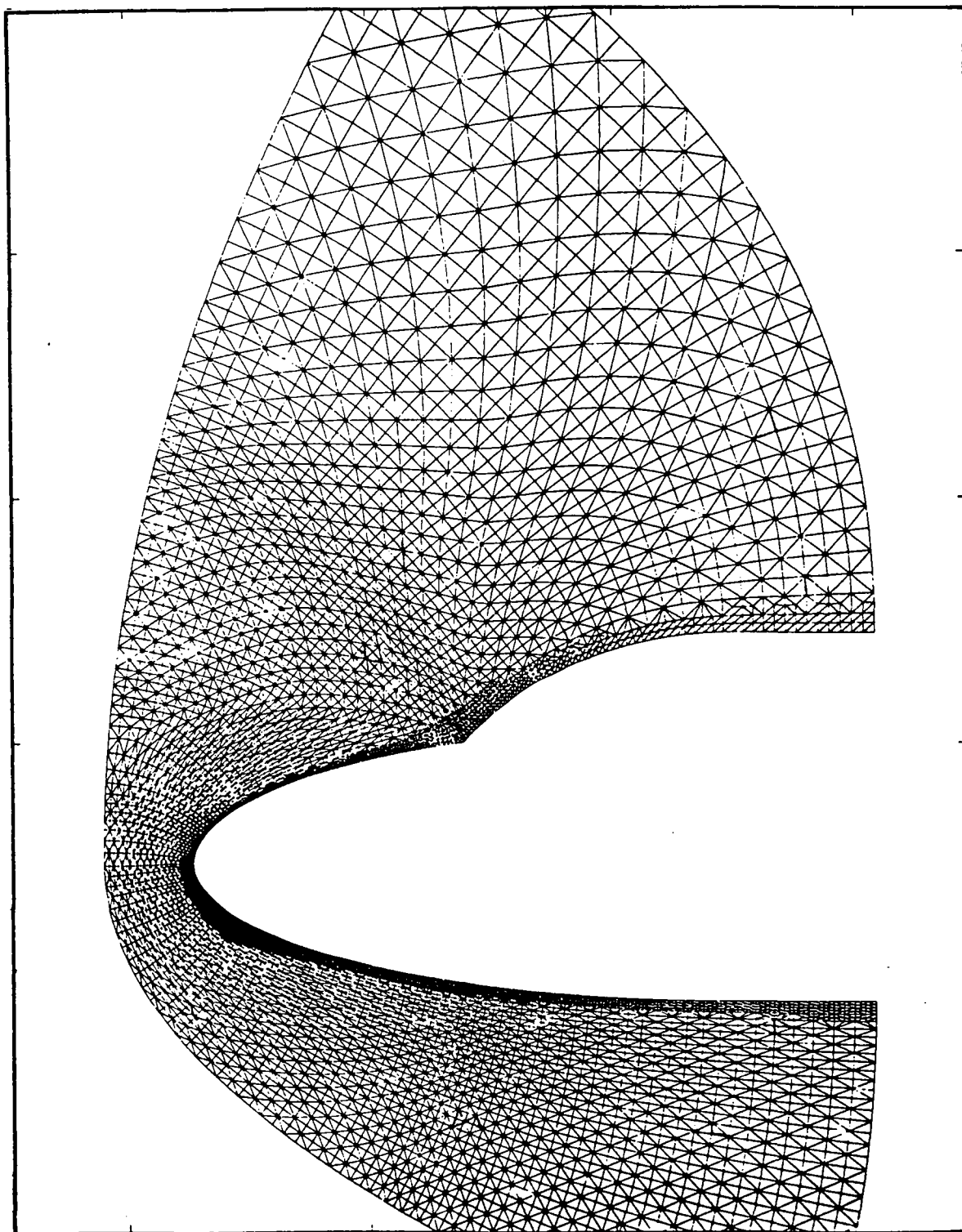


Figure 22: Isovaleurs du nombre de Mach - Osher ordre 2

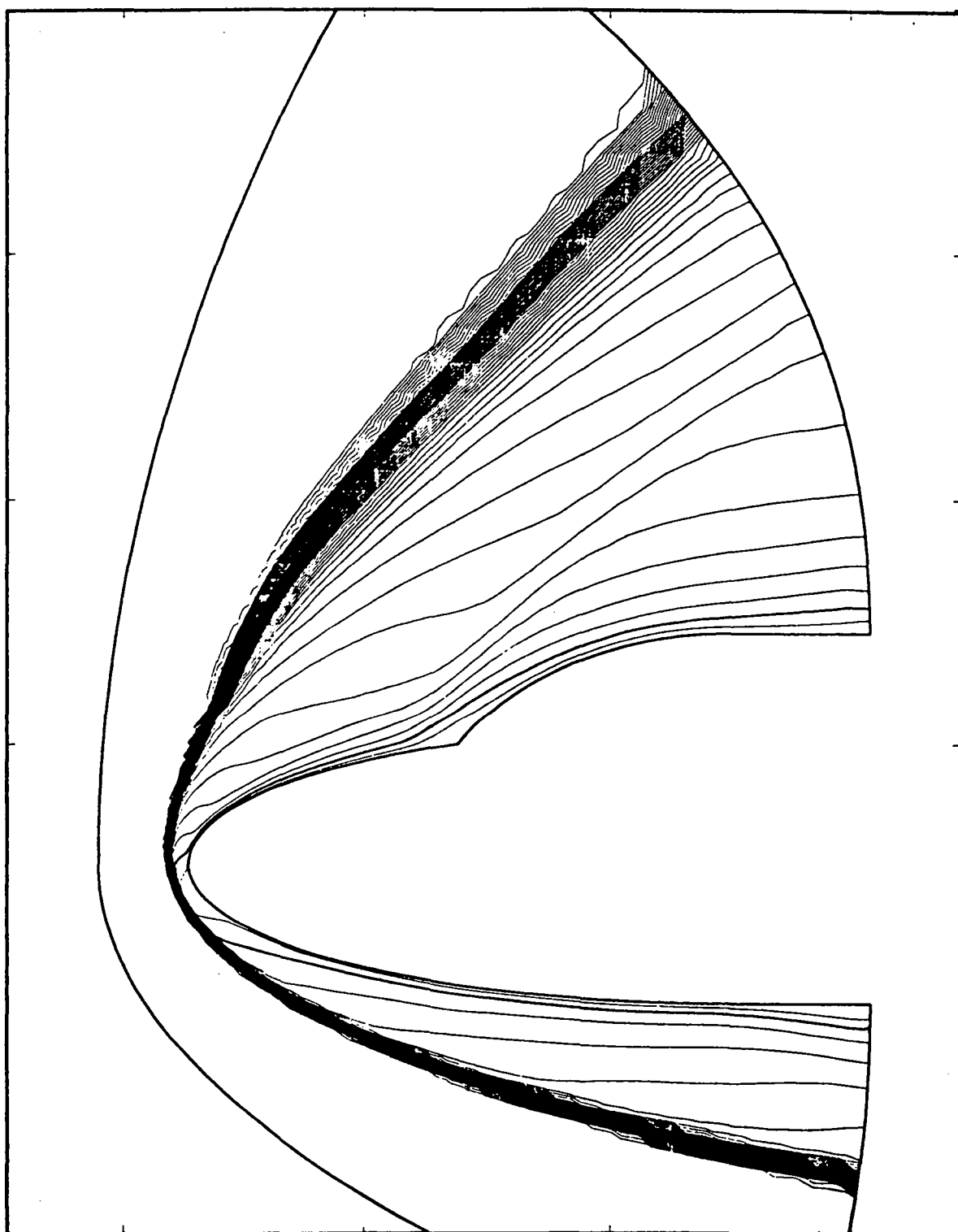


Figure 23: Isovaleurs de la température - Osher ordre 2  
 $T_{min} = 204.3^{\circ}\text{K}$  -  $T_{max} = 16883.^{\circ}\text{K}$

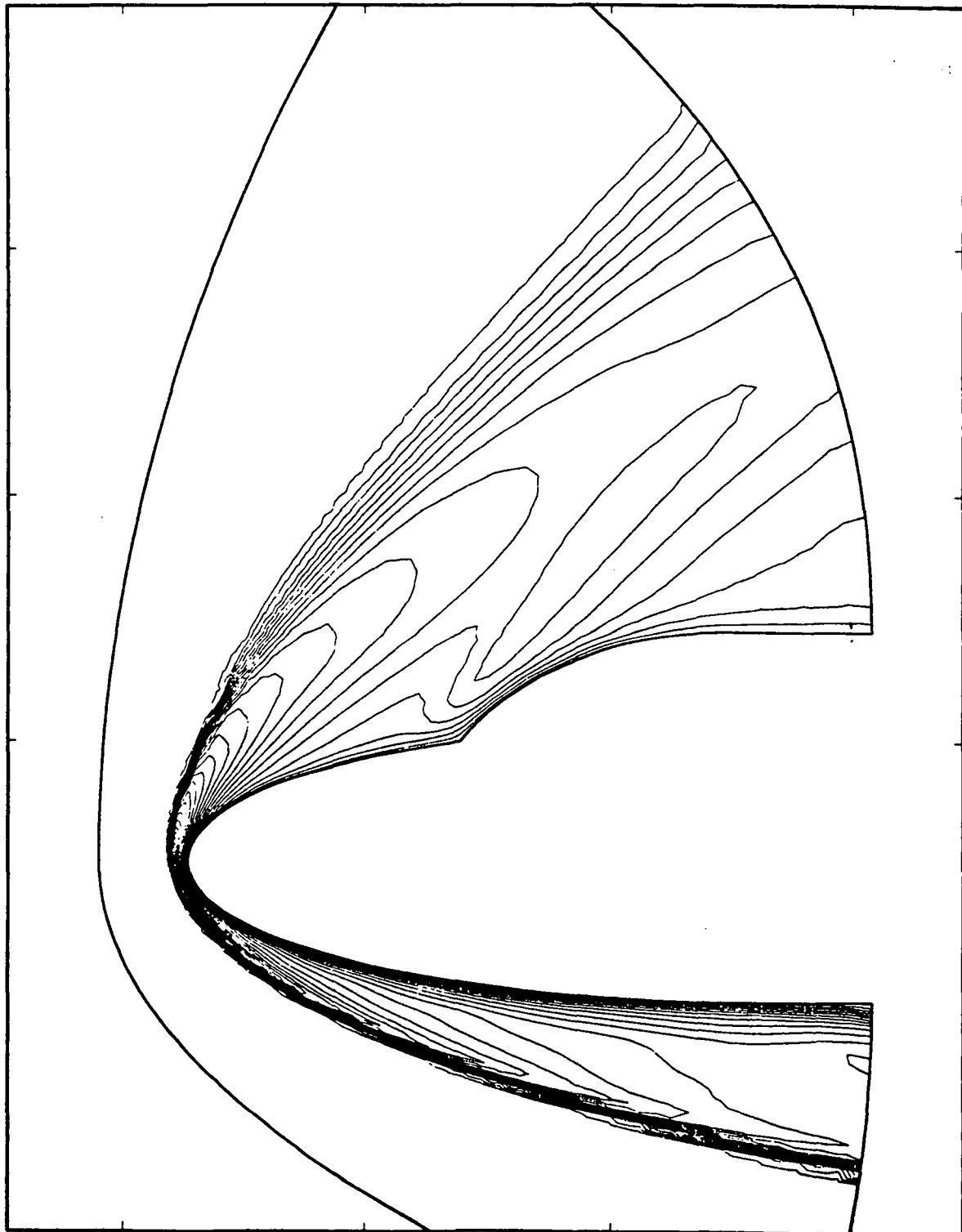
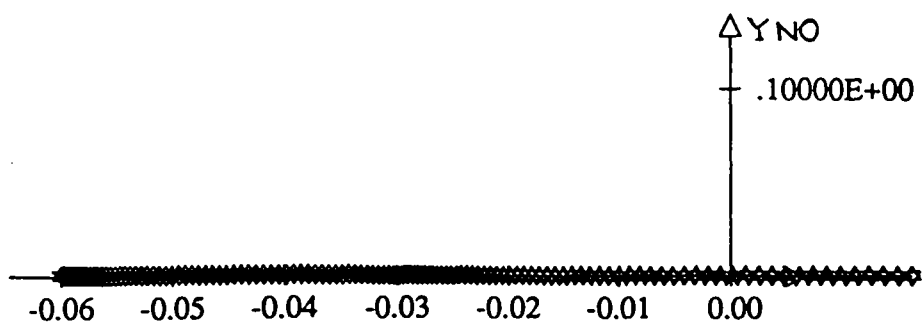
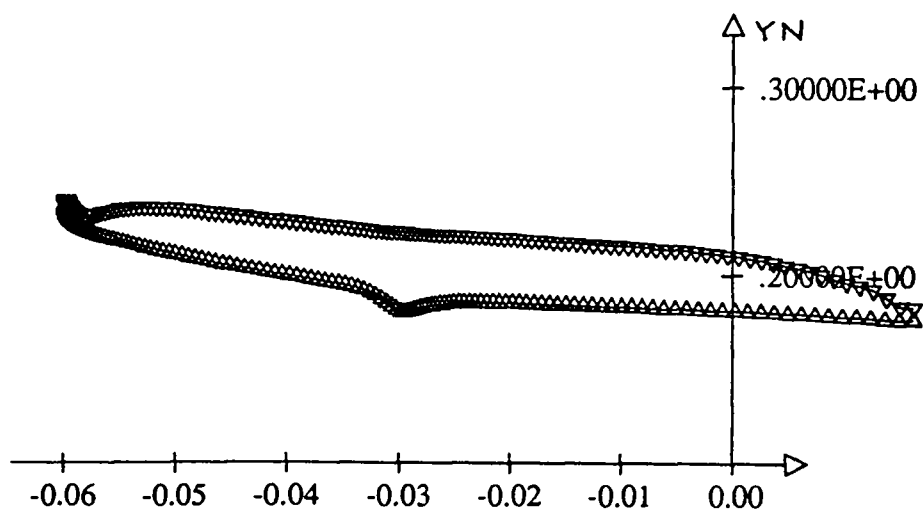
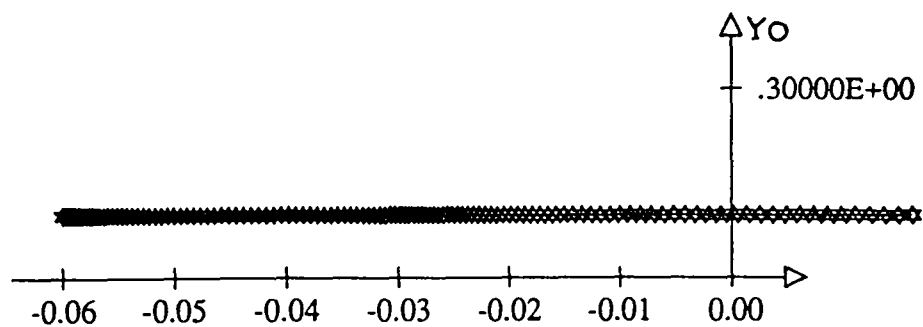


Figure 24: Profils des fractions massiques





## 7 Conclusions

On a présenté un premier modèle pour résoudre des écoulements hypersoniques visqueux hors-équilibre. Ce modèle simplifié permet pourtant de mettre en évidence les phénomènes physiques se produisant dans la couche limite, notamment une recombinaison de  $N_2$  près de la paroi, que l'on ne rencontrait pas dans le cas non visqueux [10].

Cette étude a également permis d'identifier les problèmes numériques provenant de la présence des termes diffusifs. On a pu obtenir des solutions d'ordre 2 en espace en utilisant des limiteurs appropriés appliqués à des variables spécialement adaptées au cas des écoulements réactifs. Une comparaison de plusieurs méthodes de décomposition de flux montre l'incidence du traitement des flux convectifs. Le flux de van Leer avec recentrage à la paroi permet d'obtenir des résultats comparables à ceux du schéma d'Osher, compensant l'insuffisance à petit nombre de Mach de cette décomposition près de la paroi; de plus, cette méthode est moins coûteuse.

Le code de calcul étant totalement vectorisé, le surcoût par itération des termes visqueux est négligeable. En revanche, les pas de temps étant réduits par la présence de la viscosité et les maillages étant raffinés, les calculs sont très coûteux. Une méthode de résolution implicite serait nécessaire pour améliorer les temps de calcul et c'est une des perspectives à ce travail.

## Remerciements

Ce travail a été soutenu en partie par un contrat de Dassault Industries dans le cadre du programme Hermès. Je tiens à remercier Messieurs Jean-Antoine Désideri et Alain Dervieux pour leurs précieux conseils et l'attention qu'ils ont portée à ce travail.

## 8 Annexe

### 8.1 Les enthalpies de formation

Les valeurs des enthalpies de formation que l'on a utilisées lors des calculs sont les suivantes.

$O$	$h_1^0$	$15.575 \cdot 10^6$
$N$	$h_2^0$	$33.76 \cdot 10^6$
$NO$	$h_3^0$	$2.99 \cdot 10^6$

Enthalpies de formation en  $J.m^3/kg$

### 8.2 Les températures de vibration

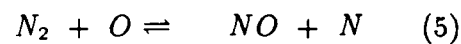
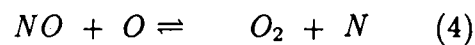
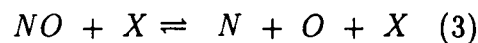
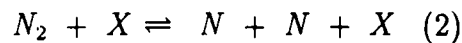
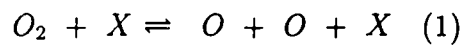
Les températures caractéristiques de vibration des espèces diatomiques sont

$NO$	$\Theta_{v_3}$	2817.
$O_2$	$\Theta_{v_4}$	2239.
$N_2$	$\Theta_{v_5}$	3390.

Températures caractéristiques de vibration en  $^{\circ}K$

### 8.3 Le modèle de Park

On reproduit ici les constantes du modèle proposé par Park [20] que nous utilisons pour calculer les termes source. Park ne propose des valeurs que pour 17 des réactions. On numérote celles-ci comme suit ( $j = 17$ )



(4)

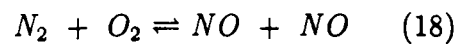
Table I: On présente pour une réaction  $j$  les constantes d'équilibre  $A_i$ , pour  $i = 1, \dots, 5$

$j$	$i = 1$	$i = 2$	$i = 3$	$i = 4$	$i = 5$
1	1.335	-4.127	-0.616	0.093	-0.005
2	3.898	-12.611	0.683	-0.118	0.006
3	1.549	-7.784	0.228	-0.043	0.002
4	0.215	-3.657	0.843	-0.136	0.007
5	2.349	-4.828	0.455	-0.075	0.004

Table II: Pour une réaction  $j$ , on donne les valeurs des constantes  $C_j$ , des exposants de température  $s_j$  et des températures d'activation  $D_j/k$  intervenant dans le calcul des taux de réaction directe.

$j$	$X$	$C_j$	$s_j$	$D_j/k$
1	$X = O$	$8.25 \cdot 10^{19}$	-1.	59500.
	$X = N$	$8.25 \cdot 10^{19}$	-1.	59500.
	$X = NO$	$2.75 \cdot 10^{19}$	-1.	59500.
	$X = O_2$	$2.75 \cdot 10^{19}$	-1.	59500.
	$X = N_2$	$2.75 \cdot 10^{19}$	-1.	59500.
2	$X = O$	$1.11 \cdot 10^{22}$	-1.6	113200.
	$X = N$	$1.11 \cdot 10^{22}$	-1.6	113200.
	$X = NO$	$3.7 \cdot 10^{21}$	-1.6	113200.
	$X = O_2$	$3.7 \cdot 10^{21}$	-1.6	113200.
	$X = N_2$	$3.7 \cdot 10^{21}$	-1.6	113200.
3	$X = O$	$4.6 \cdot 10^{17}$	-0.5	75500.
	$X = N$	$4.6 \cdot 10^{17}$	-0.5	75500.
	$X = NO$	$2.3 \cdot 10^{17}$	-0.5	75500.
	$X = O_2$	$2.3 \cdot 10^{17}$	-0.5	75500.
	$X = N_2$	$2.3 \cdot 10^{17}$	-0.5	75500.
4		$2.16 \cdot 10^8$	1.29	19220.
5		$3.18 \cdot 10^{13}$	0.1	37700.

Si l'on souhaite ajouter la dix-huitième réaction



il est alors possible d'utiliser un ensemble de valeurs proposées par R. Brun et al. [3], on obtient

$$Kf = Cf T^{s_f} \exp\left(\frac{-Df}{kT}\right)$$

avec

$Cf$	$s_f$	$Df/k$
$4.6 \cdot 10^{24}$	-2.5	64600.

et

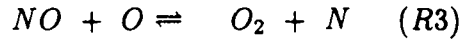
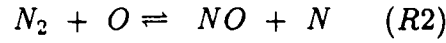
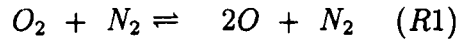
$$Kr = Cr T^{s_r} \exp\left(\frac{-Dr}{kT}\right)$$

avec

$Cr$	$s_r$	$Dr/k$
$4.8 \cdot 10^{23}$	-2.5	85000.

#### 8.4 Le calcul des termes source

Nous allons expliquer comment calculer le terme source dans le cas très simplifié d'un modèle à trois réactions seulement



On considère donc  $s$  ( $s = 5$ ) espèce et  $j$  ( $j = 3$ ) réactions. Ces réactions peuvent se réécrire en faisant apparaître les coefficients stœchiométriques  $\sigma'_{sj}$  et  $\sigma''_{sj}$  pour les états gauche et droit

$$\sum_s \sigma'_{sj} A_s = \sum_s \sigma''_{sj} A_s$$

Si l'on note  $Kf_j(T)$  et  $Kr_j(T)$  les taux de réaction associés aux parties directe et indirecte de la réaction  $j$ , on peut écrire

$$J_j = Kf_j(T) \prod_{s=sl} \left(\frac{\rho_s}{\bar{m}_s}\right)^{\sigma'_{sj}} - Kr_j(T) \prod_{s=sr} \left(\frac{\rho_s}{\bar{m}_s}\right)^{\sigma''_{sj}}$$

où  $sl$  (resp.  $sr$ ) représente les espèces présentes dans la partie gauche (resp. droite) de la réaction  $j$ .

Ainsi pour une espèce donnée, le taux de production est

$$\omega_s = \bar{m}_s \sum_{j=1}^3 (\sigma''_{sj} - \sigma'_{sj}) J_j$$

Dans notre cas particulier

$$\left\{ \begin{array}{l} \omega_1 = \bar{m}_1 (2J_1 - J_2 - J_3) \\ \omega_2 = \bar{m}_2 (J_2 + J_3) \\ \omega_3 = \bar{m}_3 (J_2 - J_3) \\ \omega_4 = \bar{m}_4 (-J_1 + J_3) \\ \omega_5 = -\bar{m}_5 J_2 \end{array} \right. \quad (5)$$

avec

$$\begin{cases} J_1 = K f_1(T) \left(\frac{\rho_4}{m_4}\right) \left(\frac{\rho_5}{m_5}\right) - K r_1(T) \left(\frac{\rho_1}{m_1}\right)^2 \left(\frac{\rho_5}{m_5}\right) \\ J_2 = K f_2(T) \left(\frac{\rho_5}{m_5}\right) \left(\frac{\rho_1}{m_1}\right) - K r_2(T) \left(\frac{\rho_3}{m_3}\right) \left(\frac{\rho_2}{m_2}\right) \\ J_3 = K f_3(T) \left(\frac{\rho_3}{m_3}\right) \left(\frac{\rho_1}{m_1}\right) - K r_3(T) \left(\frac{\rho_4}{m_4}\right) \left(\frac{\rho_2}{m_2}\right) \end{cases}$$

Reste à donner l'expression des taux de réaction. Le taux de réaction directe est une fonction qui ne dépend que de la température

$$K f_j(T) = C_j T^{s_j} \exp\left(\frac{-D_j}{kT}\right)$$

Les taux de réaction indirecte  $K r_j(T)$  sont calculés à partir des coefficients d'équilibre

$$K r_j = \frac{K eq_j}{K f_j}$$

avec

$$\begin{cases} K eq_j(T) = \exp(A_1 + A_2 Z + A_3 Z^2 + A_4 Z^3 + A_5 Z^4) \\ Z = \frac{10000}{T} \end{cases}$$

Pour un modèle contenant plus de trois réactions, on suit exactement la même démarche. Les calculs étant beaucoup plus longs, nous avons jugé préférable, pour la clarté de l'exposé, de se limiter au modèle simplifié.

## 8.5 La matrice jacobienne de $\Omega$

Dans la méthode de résolution, il faut calculer la matrice jacobienne du terme source  $\Omega$  par rapport à  $W_C = (\rho_1, \rho_2, \rho_3)^T$ . Pour expliquer simplement le calcul de cette matrice, nous allons nous placer dans le cas simplifié du modèle à trois réactions.

On rappelle que pour une espèce  $s$ , le taux de production est

$$\omega_s = \overline{m}_s \sum_{j=1}^3 (\sigma''_{s,j} - \sigma'_{s,j}) J_j$$

On cherche à calculer la matrice  $\partial \Omega(W_C, T) / \partial W_C$ , c'est à dire les  $\partial \omega_s / \partial \rho_l$  pour  $l = 1, \dots, 3$

$$\frac{\partial \omega_s}{\partial \rho_l} = \overline{m}_s \sum_{j=1}^3 (\sigma''_{s,j} - \sigma'_{s,j}) \frac{\partial J_j}{\partial \rho_l}$$

Les termes  $J_j$  ont pour expression

$$J_j = K f_j(T) \prod_{s=sl} \left( \frac{\rho_s}{\bar{m}_s} \right)^{\sigma'_{sj}} - K r_j(T) \prod_{s=sr} \left( \frac{\rho_s}{\bar{m}_s} \right)^{\sigma''_{sj}}$$

donc

$$\begin{aligned} \frac{\partial J_j}{\partial \rho_l} &= \frac{\partial K f_j(T)}{\partial \rho_l} \prod_{s=sl} \left( \frac{\rho_s}{\bar{m}_s} \right)^{\sigma'_{sj}} - \frac{\partial K r_j(T)}{\partial \rho_l} \prod_{s=sr} \left( \frac{\rho_s}{\bar{m}_s} \right)^{\sigma''_{sj}} \\ &+ K f_j(T) \frac{\partial}{\partial \rho_l} \left[ \prod_{s=sl} \left( \frac{\rho_s}{\bar{m}_s} \right)^{\sigma'_{sj}} \right] - K r_j(T) \frac{\partial}{\partial \rho_l} \left[ \prod_{s=sr} \left( \frac{\rho_s}{\bar{m}_s} \right)^{\sigma''_{sj}} \right] \end{aligned}$$

On ne souhaite obtenir des dérivées que par rapport aux trois  $\rho_l$  de calcul donc pour exprimer les  $\partial \rho_4 / \partial \rho_l$  et  $\partial \rho_5 / \partial \rho_l$ , on dérive les relations déduites des équations de conservation scalaires

$$\begin{cases} \rho_4 = \frac{24}{103} \rho - \rho_1 - \frac{8}{15} \rho_3 \\ \rho_5 = \frac{79}{103} \rho - \rho_2 - \frac{7}{15} \rho_3 \end{cases}$$

Il faut ensuite calculer les

$$\frac{\partial K f_j(T)}{\partial \rho_l} \quad \text{et} \quad \frac{\partial K r_j(T)}{\partial \rho_l}$$

Sachant que

$$K f_j(T) = C_j T^{\sigma_j} \exp \left( \frac{-D_j}{kT} \right)$$

on obtient

$$\frac{\partial K f_j(T)}{\partial \rho_l} = \frac{\partial K f_j(T)}{\partial T} \cdot \frac{\partial T}{\partial \rho_l}$$

de même

$$K r_j(T) = \frac{K eq_j(T)}{K f_j(T)}$$

donc

$$\begin{aligned} \frac{\partial K r_j(T)}{\partial \rho_l} &= \frac{\partial K r_j(T)}{\partial T} \cdot \frac{\partial T}{\partial \rho_l} \\ &= \frac{\frac{\partial K eq_j(T)}{\partial T} K f_j(T) - K eq_j(T) \frac{\partial K f_j(T)}{\partial T}}{K f_j(T)^2} \cdot \frac{\partial T}{\partial \rho_l} \end{aligned}$$

Pour terminer cette description, il nous reste à calculer les  $\partial T / \partial \rho_l$ . Pour cela, on va dériver l'équation d'énergie dont on tire la température à chaque pas de temps

$$E = \frac{1}{2} \rho \|\vec{V}\|^2 + \sum_{s=1}^5 \rho_s c_{v,s} T + \sum_{s=1}^3 \rho_s h_s^0 + \sum_{s=3}^5 \frac{\rho_s R_s \Theta_{v,s}}{e^{\frac{\Theta_{v,s}}{T}} - 1}$$

et l'on obtient

$$\frac{\partial T}{\partial \rho_l} = - \frac{\sum_{s=1}^5 \left( \frac{\partial \rho_s}{\partial \rho_l} \right) c_{v,s} T + \sum_{s=1}^3 \left( \frac{\partial \rho_s}{\partial \rho_l} \right) h_s^0 + \sum_{s=3}^5 \left( \frac{\partial \rho_s}{\partial \rho_l} \right) \frac{R_s \Theta_{v,s}}{e^{\frac{\Theta_{v,s}}{T}} - 1}}{\sum_{s=1}^5 \rho_s c_{v,s} + \sum_{s=3}^5 \frac{\rho_s R_s \Theta_{v,s}^2}{\left( e^{\frac{\Theta_{v,s}}{T}} - 1 \right)^2} \cdot \frac{e^{\frac{\Theta_{v,s}}{T}}}{T^2}}$$

## 8.6 Le modèle de Blottner

Pour calculer la viscosité d'une espèce, on utilise le modèle de Blottner [1]

$$\mu_s = 0.1, \exp((A_s \ln T + B_s) \ln T + C_s)$$

les coefficients  $A_s$ ,  $B_s$  et  $C_s$  ont pour valeur

Espèce $s$	$A_s$	$B_s$	$C_s$
$O$	0.0203144	0.4294404	-11.6031403
$N$	0.0115572	0.6031679	-12.4327495
$NO$	0.0436378	-0.0335511	-9.5767430
$O_2$	0.0449290	-0.0826158	-9.2019475
$N_2$	0.0268142	0.3177838	-11.3155513

## Références

- [1] BLOTTNER F.G., JOHNSON M., ELLIS M., *Chemically Reacting Viscous Flow Program for Multi-Component Gas Mixtures*, Report No. SC-RR-70-754, Sandia Laboratories, Albuquerque, New Mexico (1971).
- [2] BOTTA N., CICCOLI M.-C., DESIDERI J.-A., FEZOU L., GLINSKY N., HETTENA E., OLIVIER C., *Reactive Flow Computations by Upwind Finite Elements*, Contribution No.36 au Workshop on Hypersonic Flows for Reentry Problems, Antibes, 22-25 Janvier 1990.
- [3] BRUN R., COLAS P., GUBERNATIS P., ZEITOUN D., *Etude théorique du non-équilibre physico-chimique à l'aval d'un choc fort*, Contrat d'étude et de recherche AMD-BA, No. 5 - RDMF 86, Rapport final, Juin 1987.
- [4] CANDLER G., *The Computation of Weakly Ionized Hypersonic Flows in Thermo-Chemical Nonequilibrium*, Ph. D. Stanford University (1988)
- [5] DESIDERI J.-A., GLINSKY N., HETTENA E., *Hypersonic reactive flow computations*, Computers and Fluids Vol.18, No.2, pp.151-182, 1990.
- [6] FEZOU L., *Résolution des équations d'Euler par un schéma de Van Leer en éléments finis*, Rapport de Recherche INRIA N° 358, janvier 1985.
- [7] FEZOU L., DERVIEUX A., *Finite Element non Oscillatory Schemes for Compressible Flows*, Computational Mathematics and Applications N.730, Proceedings of the 8th France-U.S.S.R.-Italy Joint Symposium, Pavie, October 1989.
- [8] FEZOU L., LANTERI S., LARROUTUROU B., OLIVIER C., *Résolution numérique des équations de Navier-Stokes pour un fluide compressible en maillage triangulaire*, Rapport de Recherche INRIA N° 1033, mai 1989.
- [9] GLINSKY N., FEZOU L., CICCOLI M.-C., DESIDERI J.-A., *Non-equilibrium Hypersonic Flow Computations by Implicit Second-order Upwind Finite-Elements*, Proceedings of the Eighth GAMM-Conference on Numerical Methods in Fluid Mechanics, Notes on Numerical Fluid Mechanics, Vol. 29, Vieweg, Braunschweig 1990.
- [10] GLINSKY N., *Simulation Numérique d'Ecoulements Hypersoniques Réactifs Hors-Equilibre Chimique*, Thèse de Doctorat, Université de Nice-Sophia-Antipolis, Novembre 1990.



- [11] GNOFFO P.A., *Hypersonic Flows over Biconics Using a Variable-Effective-Gamma, Parabolized-Navier-Stokes Code*, AIAA Paper 83-1666, AIAA 16<sup>th</sup> Fluid and Plasma Dynamics Conference, Danvers/Massachusetts, July 12-14, 1983.
- [12] GUBERNATIS P., *Ecoulements hypersoniques dissipatifs: modèles physiques et numériques, application aux ondes de choc et aux tuyères bidimensionnelles*, Thèse de Doctorat, Université d'Aix-Marseille I, Juillet 1989.
- [13] HÄNEL D., *An Implicit Flux-Vector Splitting Scheme for the Computation of Viscous Hypersonic Flows*, AIAA Paper 89-0274, 1989.
- [14] IMBERT M., *Résolution numérique des équations de Navier-Stokes pour des mélanges de gaz réactifs: application aux lasers à diffusion supersonique*, Thèse d'état, Université d'Aix-Marseille I, 1987.
- [15] LARDY P., DECONINCK H., *Comparaison de différents séparateurs de flux pour écoulements visqueux supersoniques et hypersoniques*, Preprint 1990-05/AR, à paraître dans "L'Astronautique et l'Aéronautique", Novembre 1989.
- [16] LARROUTURROU B., FEZOU L., *On the equations of multi-component perfect or real inviscid flow*, Carasso, Charrier, Hanouzet et Joly, editor, Non linear hyperbolic problems, pages 69-98, Springer-Verlag Heidelberg (1989).
- [17] MONTAGNÉ J.L., YEE H.C., VINOKUR M., *Comparative Study of High-Resolution Shock-Capturing Schemes for a Real Gas*, NASA Technical Memorandum 100004, July 1987.
- [18] OSHER S., SOLOMON F., *Upwind schemes for hyperbolic systems of conservation laws*, Math. Comp., 38, (158), pp.339-374, 1982.
- [19] PALMERIO B., *Self-adaptative F.E.M. algorithms for the Euler equations*, Rapport de Recherche INRIA No. 338, 1984.
- [20] PARK C., *On Convergence of Computation of Chemically Reacting Flows*, AIAA Paper 85-0247, AIAA 23<sup>rd</sup> Aerospace Sciences Meeting, Reno Nevada, January 14-17, 1985.
- [21] SALVETTI M.-V., CICCOLI M.-C., DESIDERI J.-A., *Non-Equilibrium Inviscid and Viscous Flows over the Double Ellipse by Adaptative Upwind Finite-Elements*, Preprints of the Workshop on Hypersonic Flows for Reentry Problems, Part II, Antibes, France, 15-19 Avril 1991.

- [22] RAIZER Y.B., ZEL'DOVICH Y.B., *Physics of Shock Waves and High-Temperature Hydrodynamics Phenomena*, (Academic Press, New-York), 1965.
- [23] Van ALBADA G.D., Van LEER B., ROBERTS W.W, *A comparative study of computational methods in cosmic gas dynamics*, Astron. Astrophys. 108, pp. 76-84 (1982).
- [24] Van LEER B., *Towards the ultimate conservative difference scheme I: The quest of monotonicity*, Lecture notes in Physics, Vol. 18 page 163 (1972).
- [25] Van LEER B., *Flux Vector Splitting for the Euler Equations*, Lecture Notes in Physics, vol. 170, page 405-512 (1982).
- [26] Van LEER B., *Computational methods for ideal compressible flow*, Cours van Karmann Institute, lecture series 1983-04, Computational fluid dynamic (1983)

**ISSN 0249 - 6399**